Univerza v Mariboru
*Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo*

**Majda KRAJNC**

# PROCESNE BILANCE

**2. popravljena in dopolnjena izdaja**

**zbirka rešenih nalog - zbrano gradivo**

Maribor, 2011

1. izdaja 2004, 2. (popravljena in dopolnjena) izdaja 2011

Majda Krajnc, Procesne bilance, zbirka rešenih nalog

Avtor: doc. dr. Majda Krajnc

Vrsta publikacije: Zbrano gradivo

Založnik: FKKT Univerze v Mariboru

Naklada: On-line

Dostopno na naslovu: http://www.fkkt.uni-mb.si/egradiva

Zbirka je dostopna tudi na elektronskem okolju Moodle pri predmetih: Procesne bilance, Kemijsko računanje II in Procesno računanje II.



ISBN 978-961-248-266-4

9 789612 482664

CIP - Kataložni zapis o publikaciji
Univerzitetna knjižnica Maribor

66.01:519.61/.64(075.8)(076.1/.2)

KRAJNC, Majda
Procesne bilance [Elektronski vir] : zbirka rešenih nalog : zbrano gradivo / Majda Krajnc. - 2. popravljena izd. - El. učbenik. - Maribor : Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, 2011

Način dostopa (URL): http://www.fkkt.uni-mb.si/egradiva

ISBN 978-961-248-266-4

COBISS.SI-ID 66653697

# Predgovor

Zbirka nalog je dopolnilo k predelanemu gradivu pri predmetih Procesne bilance in Kemijsko računanje II na univerzitetnem študijskem programu ter predmetu Procesno računanje II na visoko strokovnem programu. Zaradi omejenega števila ur predavanj ni mogoče predelati večjega števila praktičnih primerov, temveč samo osnovne primere. Zaradi tega naj vam bo zbirka kot dodatek k pripravam na pisni izpit iz omenjenih predmetov.

Zbirka je razdeljena po poglavjih, ki jih najdete v skripti Procesne bilance (avtorji: M. Krajnc, S. Oreški in F. Purkeljc) ter v Delovnem zvezku. Predlagam, da po vsakem poglavju najprej predelate naloge iz zbirke in nato rešite domačo nalogo.

Ker vsak avtor, ko piše kakršnokoli študijsko gradivo, nehote napravi veliko napak, je dobrodošla vsaka pripomba z vaše strani. Pri študiju vam želim veliko energije in logičnega razmišljanja ter uspehov na izpitu.

Majda Krajnc

Maribor, 2011.

# VSEBINA

Stran

# 1. Pretvarjanje enot veličin

**1. Naloga[1]:**

Pretvorite naslednje enote v želene:

a) 42 $ft^2/h$ v $cm^2/s$
b) 60 mi/h v m/s
c) 4,21 kW v J/s

Pri tem uporabite princip krajšanja enot in naslednje pretvornike:

1 W = 1 J/s
1 ft = 0,3048 m
1 mi = 1,609347 km

---

**Rešitev:**

a) $$\frac{42\ \text{ft}^2}{\text{h}}\left|\frac{1\ \text{h}}{3600\ \text{s}}\right|\frac{(30{,}48\ \text{cm})^2}{(1\ \text{ft})^2} = \mathbf{10{,}8}\ \frac{\mathbf{cm^2}}{\mathbf{s}}$$

b) $$\frac{60\ \text{mi}}{\text{h}}\left|\frac{1\ \text{h}}{3600\ \text{s}}\right|\frac{1609{,}347\ \text{m}}{1\ \text{mi}} = \mathbf{26{,}82}\ \frac{\mathbf{m}}{\mathbf{s}}$$

c) $$\frac{4{,}21\ \text{kW}}{}\left|\frac{1\ \text{J}\cdot\text{s}^{-1}}{1\ \text{W}}\right|\frac{1000\ \text{W}}{1\ \text{kW}} = \mathbf{4210}\ \frac{\mathbf{J}}{\mathbf{s}}$$

**2. Naloga[1]:**

a) Letalo potuje dvakrat hitreje od zvoka. S kakšno hitrostjo (v mi/h) potuje, če predpostavimo, da je hitrost zvoka 1100 ft/s ?
b) Pretvorite 400 $in^3/d$ v $cm^3/min$ !

V obeh primerih uporabite princip krajšanja enot in naslednje pretvornike:
1 milja = 1 mi = 5280 ft
1 in = 2,54 cm.

---

**Rešitev:**

a) $$\frac{2\cdot 1100\ \text{ft}}{\text{s}}\left|\frac{1\ \text{mi}}{5280\ \text{ft}}\right|\frac{3600\ \text{s}}{1\ \text{h}} = \mathbf{1500}\ \frac{\mathbf{mi}}{\mathbf{h}}$$

b) $$\frac{400\ \text{in}^3}{\text{d}}\left|\frac{1\ \text{d}}{24\text{h}}\right|\frac{1\ \text{h}}{60\ \text{min}}\left|\frac{(2{,}54\ \text{cm})^3}{(1\ \text{in})^3}\right. = \mathbf{4{,}56\ \frac{cm^3}{min}}$$

**3. Naloga[1]:**

a) Pretvorite splošno plinsko konstanto R = 1,987 cal/(mol · K) v Btu/(lbmol · °R) !
b) Pretvorite splošno plinsko konstanto R = 8,314 J/(mol · K) v (bar · L)/(mol · K) !

Uporabite princip krajšanja enot in naslednje pretvornike:

1 Btu = 252 cal
1 lbmol = 453,59 mol
1 K = 1,8 °R (temperaturna razlika na skalah)
1 J = 1 N · m
1 Pa = 1 N/m$^2$
1 bar = 10$^5$ Pa

--------------------------------------------------------------------------------------------------------------

**Rešitev:**

a) $$\frac{1{,}987\ \text{cal}}{\text{mol}\cdot\text{K}}\left|\frac{1\text{Btu}}{252\,\text{cal}}\right|\frac{453{,}59\,\text{mol}}{1\ \text{lbmol}}\left|\frac{1\text{K}}{1{,}8\ ^\circ\text{R}}\right. = \mathbf{1{,}987\ \frac{Btu}{lbmol\cdot {}^\circ R}}$$

b) $$\frac{8{,}314\ \text{J}}{\text{mol}\cdot\text{K}}\left|\frac{1\ \text{N}\cdot\text{m}}{1\ \text{J}}\right|\frac{1\text{Pa}}{1\ \text{N}\cdot\text{m}^{-2}}\left|\frac{1\ \text{bar}}{10^5\ \text{Pa}}\right|\frac{1000\ \text{dm}^3}{1\ \text{m}^3}\left|\frac{1\ \text{L}}{1\ \text{dm}^3}\right. = \mathbf{0{,}08314\ \frac{bar\cdot L}{mol\cdot K}}$$

**4. Naloga[1]:**

a) Koliko mol je 100 g $CO_2$ ?
b) Pretvorite 120 lbmol NaCl v g NaCl !
c) Pretvorite 120 lb NaCl v mol NaCl !

Pri pretvarjanu uporabite princip krajšanja enot in naslednje pretvornike:

1 lbmol = 453,59 mol
1 lb = 453,59 g

--------------------------------------------------------------------------------------------------------------

**Rešitev:**

a) $$\frac{100\ \text{g}\ CO_2}{}\left|\frac{1\ \text{mol}\ CO_2}{44\ \text{g}\ CO_2}\right. = \mathbf{2{,}27\ mol\ CO_2}$$

b) $$\frac{120\ \text{lbmol NaCl}}{} \left| \frac{453{,}59\ \text{mol NaCl}}{1\ \text{lbmol NaCl}} \right| \frac{58{,}5\ \text{g NaCl}}{1\ \text{mol NaCl}} = \mathbf{3{,}184 \times 10^{6}\ g\ NaCl}$$

c) $$\frac{120\ \text{lb NaCl}}{} \left| \frac{453{,}59\ \text{g NaCl}}{1\ \text{lb NaCl}} \right| \frac{1\ \text{mol NaCl}}{58{,}5\ \text{g NaCl}} = \mathbf{930{,}44\ mol\ NaCl}$$

**5. Naloga[2]:**

Masno toplotno kapaciteto amoniaka lahko izračunamo po naslednji enačbi:

$$c_p\left(\frac{\text{Btu}}{\text{lb} \cdot {}^{\circ}\text{F}}\right) = 0{,}487 + 2{,}29 \times 10^{-4}\, t/{}^{\circ}\text{F}$$

Izrazite enačbo tako, da bo $c_p$ v J/(g ·°C) in temperaturni člen s temperaturo v °C!

Pretvorniki: 1 Btu = 1055,06 J
1 lb = 453,59 g
$t$/°F = 1,8 · $t$/°C + 32
temperaturna razlika = $\frac{1{,}8\ {}^{\circ}\text{F}}{1\ {}^{\circ}\text{C}}$

---

**Rešitev:**

- najprej temperaturo pretvorimo v °C:

$$c_p\left(\frac{\text{Btu}}{\text{lb} \cdot {}^{\circ}\text{F}}\right) = 0{,}487 + 2{,}29 \times 10^{-4}\left[1{,}8 \cdot t/{}^{\circ}\text{C} + 32\right] = 0{,}487 + 4{,}12 \times 10^{-4} \cdot t/{}^{\circ}\text{C} + 0{,}007328 =$$

$$c_p\left(\frac{\text{Btu}}{\text{lb} \cdot {}^{\circ}\text{F}}\right) = 0{,}494 + 4{,}12 \times 10^{-4} \cdot t/{}^{\circ}\text{C}$$

- sedaj uporabimo ustrezne pretvornike za enoto $c_p$:

$$c_p = \frac{\left[0{,}494 + 4{,}12 \times 10^{-4} \cdot t/{}^{\circ}\text{C}\right]\text{Btu}}{\text{lb} \cdot {}^{\circ}\text{F}} \left| \frac{1055{,}06\ \text{J}}{1\ \text{Btu}} \right| \frac{1\ \text{lb}}{453{,}59\ \text{g}} \left| \frac{1{,}8\ {}^{\circ}\text{F}}{1\ {}^{\circ}\text{C}} \right. =$$

$$= \frac{\left[0{,}494 + 4{,}12 \times 10^{-4} \cdot t/{}^{\circ}\text{C}\right] \cdot 1899{,}1\ \text{J}}{453{,}59\ \text{g} \cdot {}^{\circ}\text{C}} = \frac{\left[0{,}494 + 4{,}12 \times 10^{-4} \cdot t/{}^{\circ}\text{C}\right] \cdot 4{,}1868\ \text{J}}{\text{g} \cdot {}^{\circ}\text{C}} =$$

$$\boldsymbol{c_p = 2{,}068 + 1{,}725 \times 10^{-3} \cdot t/{}^{\circ}\text{C}\ \left[\frac{\text{J}}{\text{g} \cdot {}^{\circ}\text{C}}\right]}$$

**6. Naloga[2]:**

a) Izračunajte gostoto tekočine v kg/m$^3$, če je $\rho$ = 68,5 lb/ft$^3$!

b) Predpostavimo temperaturno razliko od 20 °F do 80 °F.

- izračunajte obe temperaturi v °C. Kakšna je temperaturna razlika v °C?
- direktno izračunajte razliko v °C.

Pri pretvarjanju uporabite princip krajšanja enot in naslednje pretvornike:

1 ft$^3$ = 0,028316 m$^3$
1 lb = 453,59 g

------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

**Rešitev:**

a) $$\frac{68{,}5\ \text{lb}}{\text{ft}^3}\left|\frac{1\ \text{ft}^3}{0{,}028316\ \text{m}^3}\right|\frac{435{,}59\ \text{g}}{1\ \text{lb}}\left|\frac{1\ \text{kg}}{1000\ \text{g}}\right. = \mathbf{1097{,}3\ \frac{kg}{m^3}}$$

b) $\Delta t$ = 60 °F

$$t/°\text{C} = \frac{5}{9}\,(t/°\text{F} - 32) = \frac{5}{9}\,(20 - 32) = -\,\mathbf{6{,}7}$$

$$t/°\text{C} = \frac{5}{9}\,(t/°\text{F} - 32) = \frac{5}{9}\,(80 - 32) = \mathbf{26{,}6}$$

$$\Delta t/°\text{C} = 26{,}6°\text{C} - (-6{,}7)°\text{C} = \mathbf{33{,}3}$$

Direktni izračun $\Delta t$/°C:

$$\Delta t/°\text{C} = \frac{60\ °\text{F}}{}\left|\frac{1\ °\text{C}}{1{,}8\ °\text{F}}\right. = \mathbf{33{,}3}$$

**7. Naloga[3]:**

Dopolnite preglednico z ustreznimi vrednostmi temperatur:

| °C | °F | K | °R |
|---|---|---|---|
| – 40 | | | |
| | 77 | | |
| | | 698 | |
| | | | 69,8 |

------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

**Rešitev:**

| °C | °F | K | °R |
|---|---|---|---|
| – 40 | – 40 | 233 | 420 |
| 25,3 | 77 | 298,3 | 537 |
| 425 | 797 | 698 | 1257 |
| –234,2 | –390,2 | 38,8 | 69,8 |

**8. Naloga[3]:**

Pretvorite $6\ \dfrac{\mathrm{in}\cdot\mathrm{cm}^2}{\mathrm{a}\cdot\mathrm{s}\cdot\mathrm{lb}\cdot\mathrm{ft}^2}$ v SI enote!

---

**Rešitev:**

$$6\,\frac{\mathrm{in}\cdot\mathrm{cm}^2}{\mathrm{a}\cdot\mathrm{s}\cdot\mathrm{lb}\cdot\mathrm{ft}^2}\left|\frac{0{,}0254\ \mathrm{m}}{1\ \mathrm{in}}\right|\frac{\mathrm{m}^2}{10\,000\ \mathrm{cm}^2}\left|\frac{1\ \mathrm{a}}{31\,536\,000\ \mathrm{s}}\right|\frac{1\ \mathrm{lb}}{0{,}4536\ \mathrm{kg}}\left|\frac{1\ \mathrm{ft}^2}{(0{,}3048)^2\cdot\mathrm{m}^2}\right|$$

$$6\,\frac{\mathrm{in}\cdot\mathrm{cm}^2}{\mathrm{a}\cdot\mathrm{s}\cdot\mathrm{lb}\cdot\mathrm{ft}^2} = \mathbf{1{,}15\times10^{-11}}\ \frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}^2\cdot\mathrm{kg}}$$

**9. Naloga[3]:**

a) Ali je temperaturna razlika 1°C večji interval kot 1°F?
b) Ali je $t$ = 10 °C višja temperatura kot $t$ = 10 °F?

---

**Rešitev:**

a)
$\Delta t$ = 1°C = 1,8 °F
Temperaturna razlika 1°C je večji interval kot 1°F.

b)

$t/°\mathrm{F} = \frac{9}{5}\cdot t/°\mathrm{C} + 32$

$t/°\mathrm{C} = \frac{5}{9}\,(t/°\mathrm{F} - 32)$

**10 °C = 50 °F**
**10 °F = –12,2 °C**

Komentar:
$t$ = 10 °C je višja temperatura kot $t$ = 10 °F.

**10. Naloga[3]:**

Molska toplotna kapaciteta žveplove kisline ima enoto J/(mol °C) in je podana z naslednjo zvezo:

$$C_p = 139{,}1 + 1{,}56 \times 10^{-1} \cdot t$$

kjer je $t$ v °C. Spremenite izraz tako, da bo končni izraz imel enoto Btu/(lbmol °R) s temperaturo v °R!

------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

**Rešitev:**

$$C_p = [139{,}1 + 1{,}56 \times 10^{-1} ((T/°\mathrm{R} - 459{,}67 - 32)\frac{5}{9})] \cdot \frac{\mathrm{J}}{\mathrm{mol} \cdot °\mathrm{C}}\left|\frac{1\,\mathrm{Btu}}{1055\,\mathrm{J}}\right|\frac{454\,\mathrm{mol}}{1\,\mathrm{lbmol}}\left|\frac{1\,°\mathrm{C}}{1{,}8\,°\mathrm{R}}\right|$$

$$\boldsymbol{C_p = 23{,}06 + 2{,}07 \times 10^{-2} \cdot T/°\mathrm{R}} \left[\frac{\mathrm{Btu}}{\mathrm{lbmol} \cdot °\mathrm{R}}\right]$$

## LITERATURA


1. Himmelblau D. M., Supplementary Problems for Basic Principles and Calculations in Chemical Engineering, 6th edition, The University of Texas, 1996.
2. Felder R. M., Rousseau R. W., Elementary Principles of Chemical Processes, John Wiley & Sons, New York, 1978.
3. Himmelblau D. M., Riggs J. B., Basic Principles and Calculations in Chemical Engineering, 7th edition, Prentice Hall PTR, 2004.

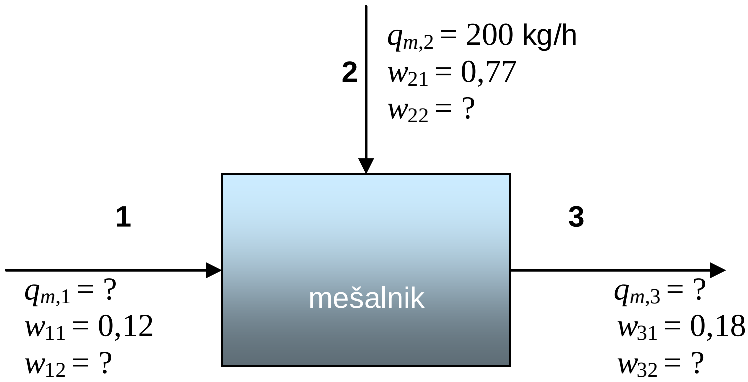
# 2. Masne bilance procesnih enot brez kemijske reakcije

**1. Naloga[1]:**

Raztopino, ki vsebuje $w(H_2SO_4)$ = 12 %, kontinuirano dovajamo v rezervoar v katerem jo pomešamo z raztopino, ki vsebuje $w(H_2SO_4)$ = 77 %. Po mešanju želimo dobiti raztopino z $w(H_2SO_4)$ = 18 %. Predpostavimo, da priteče v rezervoar 200 kg/h raztopine z $w(H_2SO_4)$ = 77 %. Izračunajte koliko kg/h želene kisline bomo dobili in koliko raztopine z $w(H_2SO_4)$ = 12 % potrebujemo.

-----------------------------------------------------------------------------------------------------------

**Rešitev:**




$H_2SO_4$ - 1
$H_2O$ - 2

1. Enačbe in omejitve:

a) Masna bilanca:

komponenta 1: $q_{m,1} \cdot w_{11} + q_{m,2} \cdot w_{21} = q_{m,3} \cdot w_{31}$ (1)

komponenta 2: $q_{m,1} \cdot w_{12} + q_{m,2} \cdot w_{22} = q_{m,3} \cdot w_{32}$ (2)

b) Omejitve za masne deleže:

$w_{11} + w_{12} = 1$ (3)

$w_{21} + w_{22} = 1$ (4)

$w_{31} + w_{32} = 1$ (5)

c) Omejitve za modelne parametre: jih ni !

2. Število spremenljivk:

Ker se obe komponenti nahajata v vseh treh tokovih, velja naslednja zveza:

$N_s = N_t (N_k + 1) + N_p = 3 (2 + 1) + 0 = 9$

3. Število načrtovalnih spremenljivk:

$N_n = N_s - N_e = 9 - 5 = 4$

Vrednosti štirih spremenljivk morajo biti znane in sicer so to: $w_{11}$, $w_{21}$, $w_{31}$, $q_{m,2}$.

4. <u>Potek reševanja:</u>

Iz enačb 3-5 izračunamo $w_{12}$, $w_{22}$ in $w_{32}$.

$w_{12} = 1 - w_{11} = 1 - 0{,}12 = \mathbf{0{,}88}$
$w_{22} = 1 - w_{21} = 1 - 0{,}77 = \mathbf{0{,}23}$
$w_{32} = 1 - w_{31} = 1 - 0{,}18 = \mathbf{0{,}82}$

Ostaneta dve enačbi z dvema neznankama: $q_{m,1}$ in $q_{m,3}$.

Iz enačbe 1 izrazimo $q_{m,1}$:

$$q_{m,1} = \frac{q_{m,3} \cdot w_{31} - q_{m,2} \cdot w_{21}}{w_{11}}$$

Izraz vstavimo v enačbo 2:

$$\frac{q_{m,3} \cdot w_{31} - q_{m,2} \cdot w_{21}}{w_{11}} \cdot w_{12} + q_{m,2} \cdot w_{22} = q_{m,3} \cdot w_{32} \quad / \cdot w_{11}$$

$$(q_{m,3} \cdot w_{31} - q_{m,2} \cdot w_{21}) \cdot w_{12} + q_{m,2} \cdot w_{22} \cdot w_{11} = q_{m,3} \cdot w_{32} \cdot w_{11}$$

$$q_{m,3} \cdot w_{31} \cdot w_{12} - q_{m,2} \cdot w_{21} \cdot w_{12} + q_{m,2} \cdot w_{22} \cdot w_{11} = q_{m,3} \cdot w_{32} \cdot w_{11}$$

$$q_{m,2} \cdot w_{22} \cdot w_{11} - q_{m,2} \cdot w_{21} \cdot w_{12} = q_{m,3} \cdot w_{32} \cdot w_{11} - q_{m,3} \cdot w_{31} \cdot w_{12}$$

$$q_{m,2}\,(w_{22} \cdot w_{11} - w_{21} \cdot w_{12}) = q_{m,3}\,(w_{32} \cdot w_{11} - w_{31} \cdot w_{12})$$

$$q_{m,3} = \frac{q_{m,2} \cdot (w_{22} \cdot w_{11} - w_{21} \cdot w_{12})}{(w_{32} \cdot w_{11} - w_{31} \cdot w_{12})} = \frac{200 \cdot (0{,}23 \cdot 0{,}12 - 0{,}77 \cdot 0{,}88)}{0{,}82 \cdot 0{,}12 - 0{,}18 \cdot 0{,}88} = \frac{200 \cdot (0{,}0276 - 0{,}6776)}{0{,}0984 - 0{,}1584} = \frac{-130}{-0{,}06} =$$

$$q_{m,3} = \mathbf{2166{,}7\ kg/h}$$

Sedaj lahko izračunamo $q_{m,1}$:

$$q_{m,1} = \frac{2166{,}7 \cdot 0{,}18 - 200 \cdot 0{,}77}{0{,}12} = \mathbf{1966{,}7\ kg/h}$$

ali iz enačbe celokupne snovne bilance:

$$q_{m,1} + q_{m,2} = q_{m,3}$$

$$q_{m,1} = q_{m,3} - q_{m,2} = 2166{,}7 - 200 = 1966{,}7 \text{ kg/h}$$

Rezultat:

K 200 kg/h vtekajoče raztopine z $w(H_2SO_4)$ = 77 % moramo kontinuirano dovajati 1966,7 kg/h raztopine z $w(H_2SO_4)$ = 12 %. Pri tem dobimo vsako uro 2166,7 kg želene raztopine z $w(H_2SO_4)$ = 18 %.

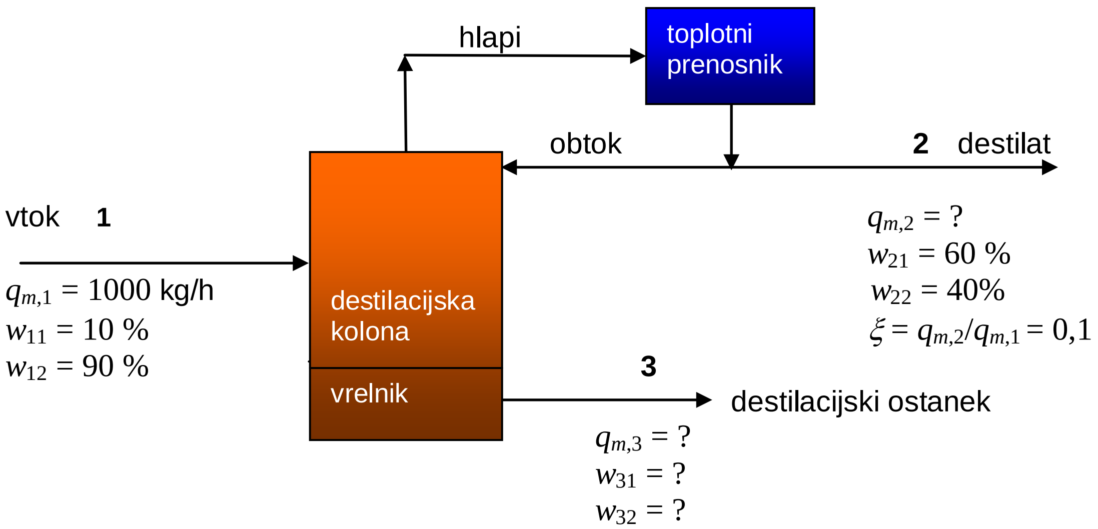
## 2. Naloga[1]:

Za destilacijsko kolono, prikazano na sliki, je potrebno izračunati masno bilanco. Pri tem je mišljeno:

a) izračunati neznana pretoka $q_{m,2}$ in $q_{m,3}$ ,

b) izračunati sestave oziroma masne deleže posameznih komponent.

Vsi podatki so razvidni iz sheme procesa.




etanol - 1

voda - 2

---

**Rešitev:**

1. Enačbe in omejitve:

a) Masna bilanca:

etanol: $q_{m,1} \cdot w_{11} = q_{m,2} \cdot w_{21} + q_{m,3} \cdot w_{31}$ (1)

voda: $q_{m,1} \cdot w_{12} = q_{m,2} \cdot w_{22} + q_{m,3} \cdot w_{32}$ (2)

b) Omejitve za masne deleže:

$\cancel{w_{11} + w_{12} = 1}$ (3)

$\cancel{w_{21} + w_{22} = 1}$ (4)

$w_{31} + w_{32} = 1$ (5)

Ker so deleži komponent v tokovih 1 in 2 znani, lahko enačbi 3 in 4 črtamo.

c) Omejitve za modelne parametre:

$q_{m,2} = \xi \cdot q_{m,1}$ (6)

2. Število spremenljivk:

Ker sta obe komponenti prisotni v vseh tokovih, velja naslednja zveza:

$N_\mathrm{s} = N_\mathrm{t}\,(N_\mathrm{k} + 1) + N_\mathrm{p} = 3\,(2 + 1) + 1 = 10$

3. Število načrtovalnih spremenljivk:

$N_\mathrm{n} = N_\mathrm{s} - N_\mathrm{e} = 10 - 4 = 6$

Podati moramo vrednosti šestih spremenljivk in sicer: $q_{m,1}$, $w_{11}$, $w_{12}$, $w_{21}$, $w_{22}$, $\xi$.

4. Potek reševanja:

Ostanejo 4 enačbe (en. 1, 2, 5 in 6) s štirimi neznankami ($q_{m,2}$, $q_{m,3}$, $w_{31}$ in $w_{32}$).
Iz enačbe 6 izračunamo $q_2$:

$q_{m,2} = q_{m,1} \cdot \xi = 1000 \cdot 0{,}1 = \mathbf{100\ kg/h}$

Če enačbi 1 in 2 seštejemo dobimo enačbo celokupne masne bilance procesa:

$q_{m,1} = q_{m,2} + q_{m,3}$

in dalje:

$q_{m,3} = q_{m,1} - q_{m,2} = 1000 - 100 = \mathbf{900\ kg/h}$

Iz enačbe 1 izračunamo $w_{31}$:

$$w_{31} = \frac{q_{m,1} \cdot w_{11} - q_{m,2} \cdot w_{21}}{q_{m,3}} = \frac{1000 \cdot 0{,}1 - 100 \cdot 0{,}6}{900} = \mathbf{0{,}044}$$

in iz enačbe 5 $w_{32}$:

$w_{32} = 1 - w_{31} = \mathbf{0{,}956}$

Rezultat prikažemo v preglednici:

| Tok št. | $q_m$ / (kg/h) | $w$ / – | |
|---|---|---|---|
| | | etanol | voda |
| 1 | 1000 | 0,1 | 0,9 |
| 2 | 100 | 0,6 | 0,4 |
| 3 | 900 | 0,044 | 0,956 |

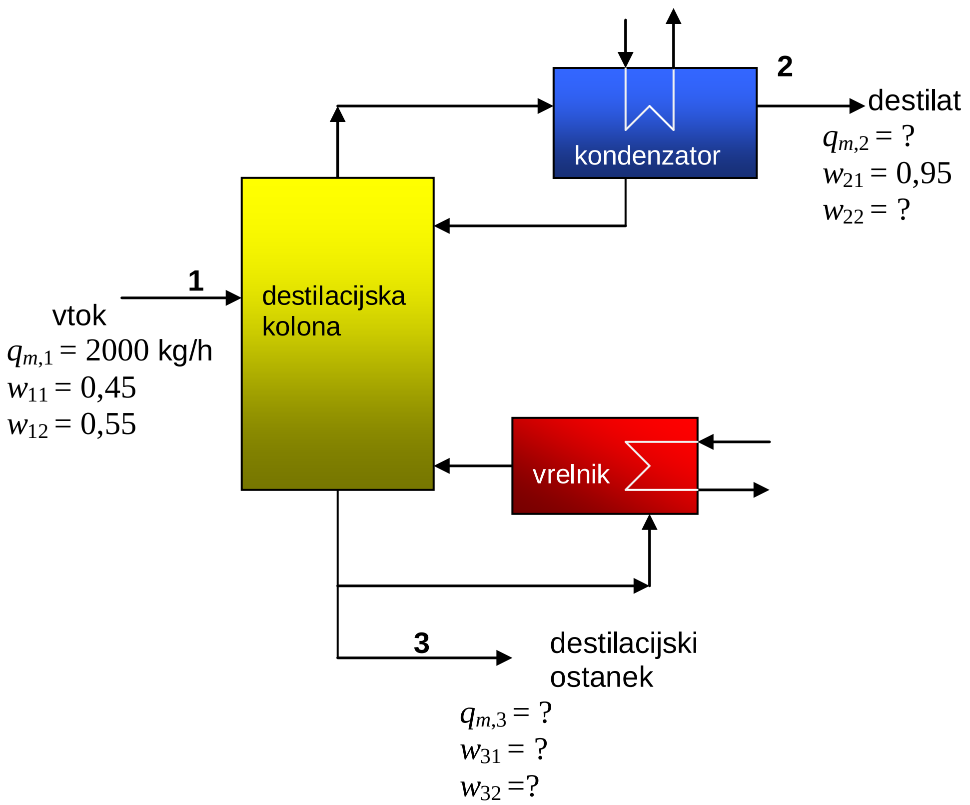
**3. Naloga:**

Binarna zmes vsebuje $w$ = 45 % benzena in $w$ = 55 % toluena. Zmes napajamo v destilacijsko kolono. Hlapi z vrha kolone (destilat) vsebujejo $w$ = 95 % benzena. Razmerje med masnim pretokom benzena v destilacijskem ostanku in na vtoku je $\xi = q_{m,31}/q_{m,11}$ = 0,08. Vtok v kolono je 2000 kg/h. Določite pretoka destilata in destilacijskega ostanka in sestavo oziroma masne deleže benzena in toluena v destilacijskem ostanku! Določite število spremenljivk ($N_\mathrm{s}$) in definirajte načrtovalne spremenljivke ($N_\mathrm{n}$).

----------------------------------------------------------------------------------------------------------

**<u>Rešitev:</u>**

Najprej narišemo poenostavljeno procesno shemo:




1 – benzen
2 – toluen

1. Enačbe in omejitve:

a) Masna bilanca:

benzen: $q_{m,1} \cdot w_{11} = q_{m,2} \cdot w_{21} + q_{m,3} \cdot w_{31}$ (1)

toluen: $q_{m,1} \cdot w_{12} = q_{m,2} \cdot w_{22} + q_{m,3} \cdot w_{32}$ (2)

b) Omejitve za masne deleže:

$\cancel{w_{11} + w_{12} = 1}$ (3)

$w_{21} + w_{22} = 1$ (4)

$w_{31} + w_{32} = 1$ (5)

Ker sta deleža komponent v toku 1 znana, lahko enačbo 3 črtamo.

c) Omejitve za modelne parametre:

$q_{m,31} = \xi \cdot q_{m,11}$ (6)

2. Število spremenljivk:

Ker sta obe komponenti prisotni v vseh tokovih, lahko uporabimo naslednjo zvezo:

$N_s = N_t (N_k + 1) + N_p = 3 (2 + 1) + 1 = 10$

3. Število načrtovalnih spremenljivk:

$N_n = N_s – N_e = 10 – 5 = 5$

Načrtovalne spremenljivke so: $q_{m,1}$, $w_{11}$, $w_{12}$, $w_{21}$ in $\xi$. Njihove vrednosti so naslednje:

$q_{m,1}$ = 2000 kg/h
$w_{11}$ = 0,45
$w_{12}$ = 0,55
$w_{21}$ = 0,95
$\xi$ = 0,08

4. Potek reševanja:

Ostane 5 enačb (en. 1, 2, 4, 5 in 6) s petimi neznankami: $q_{m,2}$, $q_{m,3}$, $w_{22}$, $w_{31}$ in $w_{32}$.

Iz enačbe 6 izračunamo $q_{m,31}$:

$$q_{m,31} = q_{m,11} \cdot \xi = q_{m,1} \cdot w_{11} \cdot \xi = 2000 \cdot 0{,}45 \cdot 0{,}08 = 72 \text{ kg/h}$$

Ker prav tako velja $q_{m,31} = q_{m,3} \,.\, w_{31}$, lahko iz enačbe 1 izrazimo $q_{m,2}$:

$$q_{m,2} = \frac{q_{m,1} \cdot w_{11} - q_{m,31}}{w_{21}} = \frac{2000 \cdot 0{,}45 - 72}{0{,}95} = \mathbf{872\ kg/h}$$

Iz enačbe 4 izračunamo $w_{22}$:

$$w_{22} = 1 - w_{21} = 1 - 0{,}95 = \mathbf{0{,}05}$$

Iz enačbe 2 izračunamo pretok toluena v destilacijskem ostanku:

$$q_{m,3} \cdot w_{32} = q_{m,1} \cdot w_{12} - q_{m,2} \cdot w_{22}$$

$$q_{m,3} \cdot w_{32} = 2000 \cdot 0{,}55 - 872 \cdot 0{,}05 = 1100 - 44 = \mathbf{1056\ kg/h}$$

Če bi sešteli enačbi 1 in 2, bi ugotovili, da velja:

$$q_{m,1} \cdot w_{11} + q_{m,1} \cdot w_{12} = q_{m,1}, \qquad \text{če je} \quad w_{11} + w_{12} = 1$$

in dalje:

$$q_{m,2} \cdot w_{21} + q_{m,2} \cdot w_{22} = q_{m,2}, \qquad \text{če je} \quad w_{21} + w_{22} = 1$$

in dalje:

$$q_{m,3} \cdot w_{31} + q_{m,3} \cdot w_{32} = q_{m,3}, \qquad \text{če je} \quad w_{31} + w_{32} = 1$$

Na koncu velja: $q_{m,1} = q_{m,2} + q_{m,3}$

Iz enega od zgornjih izrazov lahko izračunamo $q_{m,3}$:

$$q_{m,3} = q_{m,3} \cdot w_{31} + q_{m,3} \cdot w_{32} = q_{m,31} + q_{m,32} = 72 + 1056 = \mathbf{1128\ kg/h}$$

Iz enačbe 1 izračunamo $w_{31}$:

$$w_{31} = \frac{q_{m,1} \cdot w_{11} - q_{m,2} \cdot w_{21}}{q_{m,3}} = \frac{2000 \cdot 0{,}45 - 872 \cdot 0{,}95}{1128} = \frac{900 - 828}{1128} = \mathbf{0{,}064}$$

Iz enačbe 5 izračunamo $w_{32}$:

$$w_{32} = 1 - w_{31} = 1 - 0{,}064 = \mathbf{0{,}936}$$

Rezultate podamo v preglednici:

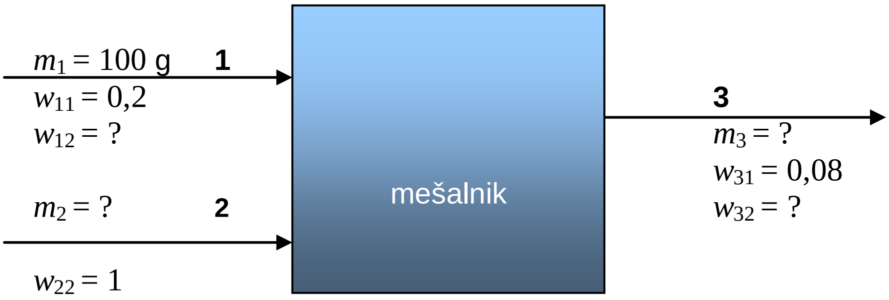
| Tok št. | $q_m$ / (kg/h) | $w$ / – | |
|---|---|---|---|
| | | benzen | toluen |
| 1 | 2000 | 0,45 | 0,55 |
| 2 | 872 | 0,95 | 0,05 |
| 3 | 1128 | 0,064 | 0,936 |

**4. Naloga:**

Iz vodne raztopine, ki vsebuje $w$(NaOH) = 20 %, želimo pridobiti raztopino z $w$(NaOH) = 8 %. Koliko vode moramo doliti in koliko končne raztopine dobimo? Za osnovo vzamemo 100 g raztopine z $w$(NaOH) = 20 %. Določite število spremenljivk ($N_s$) in definirajte načrtovalne spremenljivke ($N_n$) !

-----------------------------------------------------------------------------------------------------------

**Rešitev:**




NaOH – 1
$H_2O$ – 2

1. Enačbe in omejitve:

a) Masna bilanca:

NaOH: $m_1 \cdot w_{11} = m_3 \cdot w_{31}$ (1)

$H_2O$: $m_1 \cdot w_{12} + m_2 \cdot w_{22} = m_3 \cdot w_{32}$ (2)

b) Omejitve za masne deleže:

$w_{11} + w_{12} = 1$ (3)

$w_{31} + w_{32} = 1$ (4)

b) Omejitve za modelne parametre: jih ni !

2. Število spremenljivk:

Ker komponenti nista prisotni v vseh tokovih, moramo spremenljivke prešteti: $N_s = 8$

3. Število načrtovalnih spremenljivk:

$N_n = N_s - N_e = 8 - 4 = 4$

Vrednosti načrtovalnih spremenljivk so naslednje:

$m_1 = 100$ g
$w_{11} = 0{,}2$
$w_{22} = 1$
$w_{31} = 0{,}08$

4. Potek reševanja:

Iz enačb 3 in 4 lahko direktno izračunamo $w_{12}$ in $w_{32}$:

$w_{12} = 1 - w_{11} = 1 - 0{,}2 = \mathbf{0{,}8}$

$w_{32} = 1 - w_{31} = 1 - 0{,}08 = \mathbf{0{,}92}$

Iz enačbe 1 izračunamo $m_3$:

$$m_3 = \frac{m_1 \cdot w_{11}}{w_{31}} = \frac{100 \cdot 0{,}2}{0{,}08} = \mathbf{250\ g}$$

in iz enačbe 2 $m_2$:

$$m_2 = \frac{m_3 \cdot w_{32} - m_1 \cdot w_{12}}{w_{22}} = \frac{250 \cdot 0{,}92 - 100 \cdot 0{,}8}{1} = \mathbf{150\ g}$$

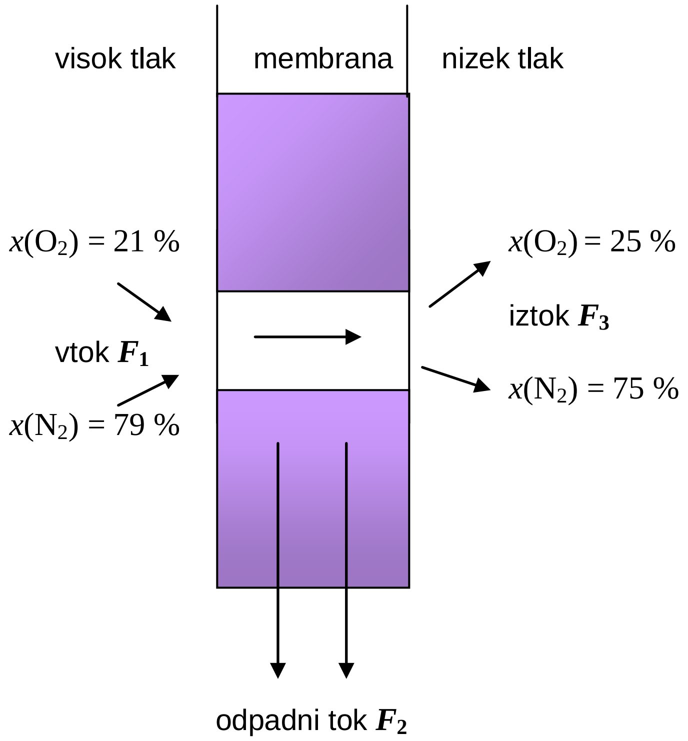
Veljati mora: $m_1 + m_2 = m_3$

100 g + 150 g = 250 g

Rezultat:
Če želimo iz 100 g raztopine z $w$(NaOH) = 20 % pripraviti raztopino z $w$(NaOH) = 8 %, ji moramo doliti 150 g $H_2O$.

## 5. Naloga[1]:

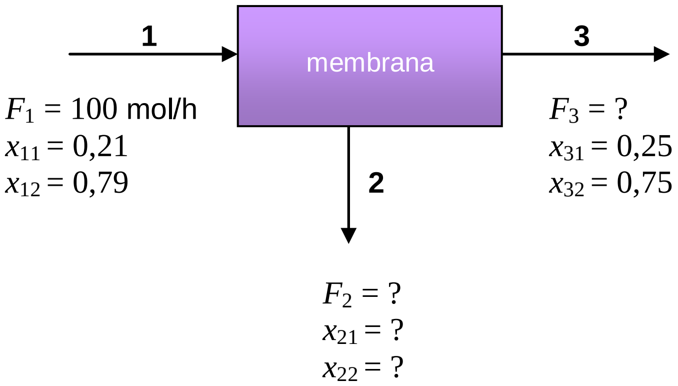
Uporaba membran za ločevanje plinov je dokaj nova tehnologija. Uspešno jih uporabljamo pri ločevanju $N_2$ in $O_2$ iz zraka. Slika predstavlja nanoporozno membrano narejeno z nanosom zelo tankega sloja polimera na porozno grafitno podporno plast. Kakšna je sestava odpadnega toka, če je razmerje med $F_2/F_1$ = 0,8. Proces obratuje v stacionarnem stanju. Za osnovo vzemimo 100 mol/h vtočne mešanice. Napišite enačbe množinske bilance in določite število neznank!




---------------------------------------------------------------------------------------------------------

**Rešitev:**

Poenostavljena procesna shema je naslednja:




$O_2$ - 1
$N_2$ - 2

1. Enačbe in omejitve:

a) Množinska bilanca:

$O_2$: $F_1 \cdot x_{11} = F_2 \cdot x_{21} + F_3 \cdot x_{31}$ (1)

$N_2$: $F_1 \cdot x_{12} = F_2 \cdot x_{22} + F_3 \cdot x_{32}$ (2)

b) Omejitve za množinske deleže:

tok 1: $\cancel{x_{11} + x_{12} = 1}$ (3)

tok 2: $x_{21} + x_{22} = 1$ (4)

tok 3: $\cancel{x_{31} + x_{32} = 1}$ (5)

Ker so deleži komponent v tokovih 1 in 3 znani, lahko enačbi 3 in 5 črtamo.

c) omejitve za modelne parametre:

$$r = \frac{F_2}{F_1} \qquad (6)$$

2. Število spremenljivk:

Ker sta obe komponenti prisotni v vseh tokovih, lahko uporabimo naslednjo zvezo:

$N_s = N_t (N_k + 1) + N_p = 3 (2 + 1) + 1 = 10$

3. Število načrtovalnih spremenljivk:

$N_n = N_s – N_e = 10 – 4 = 6$

Poznati moramo vrednosti šestih spremenljivk in sicer:

$x_{11} = 0,21$
$x_{12} = 0,79$
$x_{31} = 0,25$
$x_{32} = 0,75$
$F_1 = 100$ mol/h
$r = 0,8$

4. Potek reševanja:

Ostanejo 4 enačbe s štirimi neznankami: $F_2$, $F_3$, $x_{21}$ in $x_{22}$.

Iz enačbe 6 izračunamo $F_2$:

$F_2 = F_1 \cdot r = 100 \,.\, 0{,}8 =$ **80 mol/h**

Če enačbi 1 in 2 seštejemo, dobimo izraz celokupne množinske bilance:

$F_1 = F_2 + F_3$

Iz izraza izračunamo $F_3$:

$F_3 = F_1 - F_2 = 100 - 80 =$ **20 mol/h**

Iz enačbe 1 izračunamo $x_{21}$:

$$x_{21} = \frac{F_1 \cdot x_{11} - F_3 \cdot x_{31}}{F_2} = \frac{100 \cdot 0{,}21 - 20 \cdot 0{,}25}{80} = \mathbf{0{,}2}$$

Iz enačbe 4 izračunamo $x_{22}$:

$x_{22} = 1 - x_{21} = 1 - 0{,}2 = \mathbf{0{,}8}$

Preglednica z rezultati:

| Tok št. | $F$ / (mol/h) | $x$ / – | |
|---|---|---|---|
| | | kisik | dušik |
| 1 | 100 | 0,21 | 0,79 |
| 2 | 80 | 0,20 | 0,80 |
| 3 | 20 | 0,25 | 0,75 |

**6. Naloga[2]:**

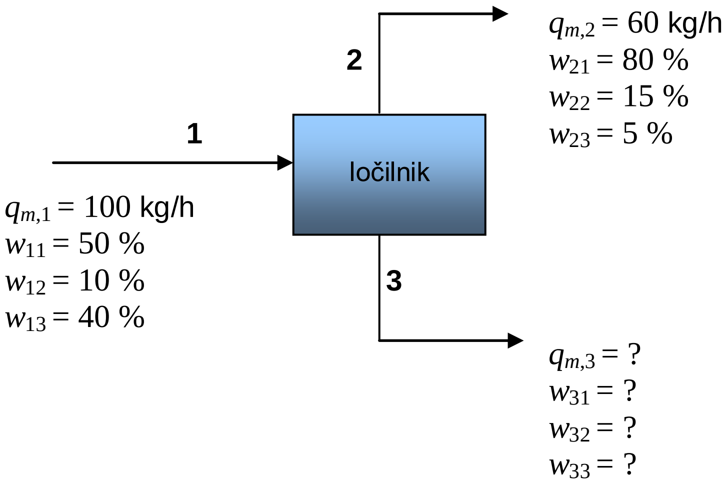
Trikomponentno mešanico napajamo s pretokom 100 kg/h v ločilnik. Sestava mešanice je naslednja: $w$(etanol) = 50 %, $w$(metanol) = 10 % in $w$(voda) = 40 %.

Ko se vzpostavi stacionarno stanje, dobimo na iztoku 2 mešanico s sestavo $w$(etanol) = 80 %, $w$(metanol) = 15 % in $w$(voda) = 5 %. Pretok tega produkta je 60 kg/h. Tok 3 je neznane sestave. Izračunajte sestavo in masni pretok toka 3 ! Določite $N_s$ in $N_n$ !

-----------------------------------------------------------------------------------------------------------

**Rešitev:**

Narišimo enostavno procesno shemo!




etanol - 1
metanol - 2
voda - 3

1. Enačbe in omejitve:

a) Masna bilanca:

etanol: $q_{m,1} \cdot w_{11} = q_{m,2} \cdot w_{21} + q_{m,3} \cdot w_{31}$ (1)

metanol: $q_{m,1} \cdot w_{12} = q_{m,2} \cdot w_{22} + q_{m,3} \cdot w_{32}$ (2)

voda: $q_{m,1} \cdot w_{13} = q_{m,2} \cdot w_{23} + q_{m,3} \cdot w_{33}$ (3)

b) Omejitve za masne deleže:

$\cancel{w_{11} + w_{12} + w_{13} = 1}$ (4)

$\cancel{w_{21} + w_{22} + w_{23} = 1}$ (5)

$w_{31} + w_{32} + w_{33} = 1$ (6)

Ker so deleži vseh komponent v tokovih 1 in 2 znani, enačbi 4 in 5 črtamo iz sistema enačb.

c) Omejitve za modelne parametre: jih ni!

2. Število spremenljivk:

Ker so vse komponente prisotne v vseh tokovih, velja naslednja zveza:

$$N_s = N_t (N_k + 1) + N_p = 3 (3 + 1) + 0 = 12$$

3. Število načrtovalnih spremenljivk:

$N_\mathrm{n} = N_\mathrm{s} - N_\mathrm{e} = 12 - 4 = 8$

Načrtovalne spremenljivke so: $q_{m,1}$, $q_{m,2}$, $w_{11}$, $w_{12}$, $w_{13}$, $w_{21}$, $w_{22}$, $w_{23}$. Njihove vrednosti so:

$q_{m,1}$ = 100 kg/h
$q_{m,2}$ = 60 kg/h
$w_{11}$ = 0,50
$w_{12}$ = 0,10
$w_{13}$ = 0,40
$w_{21}$ = 0,80
$w_{22}$ = 0,15
$w_{23}$ = 0,05 .

4. Potek reševanja:

Ostanejo 4 enačbe (en. 1, 2, 3 in 6) s štirimi neznankami: $q_{m,3}$, $w_{31}$, $w_{32}$ in $w_{33}$.

Če enačbe 1, 2 in 3 seštejemo velja:

$$q_{m,1}\,(w_{11} + w_{12} + w_{13}) = q_{m,2}\,(w_{21} + w_{22} + w_{23}) + q_{m,3}\,(w_{31} + w_{32} + w_{33})$$

Vsota masnih deležev komponet v toku je enaka ena. Torej velja:

$$q_{m,1} = q_{m,2} + q_{m,3}$$

in dalje:

$$q_{m,3} = q_{m,1} - q_{m,2}$$

$$q_{m,3} = 100 - 60 = \mathbf{40\ kg/h}$$

Iz enačbe 1 izrazimo in izračunamo $w_{31}$:

$$w_{31} = \frac{(q_{m,1} \cdot w_{11} - q_{m,2} \cdot w_{21})}{q_{m,3}} = \frac{(100 \cdot 0{,}5 - 60 \cdot 0{,}8)}{40} = \frac{50-48}{40} = \frac{2}{40} = \mathbf{0{,}05}$$

Iz enačbe 2 izrazimo in izračunamo $w_{32}$:

$$w_{32} = \frac{(q_{m,1} \cdot w_{12} - q_{m,2} \cdot w_{22})}{q_{m,3}} = \frac{(100 \cdot 0{,}1 - 60 \cdot 0{,}15)}{40} = \frac{10-9}{40} = \frac{1}{40} = \mathbf{0{,}025}$$

Iz enačbe 3 izrazimo in izračunamo $w_{33}$:

$$w_{33} = \frac{(q_{m,1} \cdot w_{13} - q_{m,2} \cdot w_{23})}{q_{m,3}} = \frac{(100 \cdot 0{,}4 - 60 \cdot 0{,}05)}{40} = \frac{40-3}{40} = \frac{37}{40} = \mathbf{0{,}925}$$

$w_{33}$ lahko izračunamo tudi iz en. 6:

$$w_{33} = 1 - w_{31} - w_{32} = 1 - 0{,}05 - 0{,}025 = \mathbf{0{,}925}$$

Rezultate podamo v preglednici:

| Tok št. | $q_m$ / (kg/h) | $w$ / – | | |
|---|---|---|---|---|
| | | etanol | metanol | voda |
| 1 | 100 | 0,50 | 0,10 | 0,40 |
| 2 | 60 | 0,80 | 0,15 | 0,05 |
| 3 | 40 | 0,05 | 0,025 | 0,925 |

**7. Naloga[2]:**

Tekoče lepilo, ki ga uporabljamo za laminatne plošče, vsebuje polimer raztopljen v topilu. Za uporabo je posebej važna vsebnost tega polimera v raztopini. Glede na naročilo, bi bilo potrebno proizvesti 3000 kg lepila, ki bi vsebovalo $w$(polimer) = 13 %. Za proizvodnjo imamo na voljo naslednje surovine:

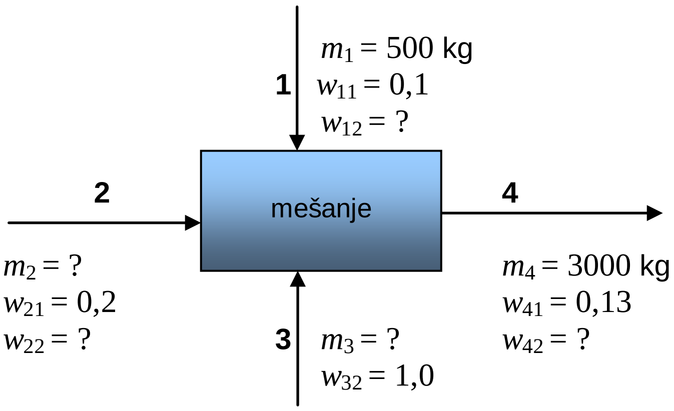
a) 500 kg raztopine, ki vsebuje $w$(polimer) = 10 %,
b) velike količine raztopine z $w$(polimer) = 20 % in
c) čisto topilo.

Izračunajte, koliko posameznih surovin morate pomešati, da dobite 3000 kg lepila ustrezne kvalitete! Predpostavite, da uporabite vso količino raztopine z $w$(polimer) = 10 %. Narišite shemo procesa in določite $N_s$ in $N_n$ !

------------------------------------------------------------------------------------------------------------

**Rešitev:**

Najprej narišemo poenostavljeno procesno shemo:




1 - polimer
2 – topilo

1. Enačbe in omejitve:

a) Masna bilanca:

komponenta 1: $m_1 \cdot w_{11} + m_2 \cdot w_{21} = m_4 \cdot w_{41}$ (1)

komponenta 2: $m_1 \cdot w_{12} + m_2 \cdot w_{22} + m_3 \cdot w_{32} = m_4 \cdot w_{42}$ (2)

b) Omejitve za masne deleže:

$w_{11} + w_{12} = 1$ (3)

$w_{21} + w_{22} = 1$ (4)

$\cancel{w_{32} = 1}$ (5)

$w_{41} + w_{42} = 1$ (6)

Ker je tok 3 čisto topilo (torej samo komponenta 2), lahko enačbo 5 črtamo.
Za reševanje problema ostane 5 enačb.

c) Omejitve za modelne parametre: jih ni !

2. Število spremenljivk:

Ker obe komponenti nista prisotni v vseh tokovih (komponente 1 ni v toku 3), preštejemo število spremenljivk:

$N_s = 11$

3. Število načrtovalnih spremenljivk:

$N_n = N_s – N_e = 11 – 5 = 6$

Načrtovalne spremenljivke so: $m_1$, $m_4$, $w_{11}$, $w_{21}$, $w_{32}$ in $w_{41}$. Njihove vrednosti so naslednje:

$m_1 = 500$ kg
$m_4 = 3000$ kg
$w_{11} = 0{,}1$
$w_{21} = 0{,}2$
$w_{32} = 1$
$w_{41} = 0{,}13$

4. Potek reševanja:

Ostane 5 enačb (en. 1, 2, 3, 4 in 6) s petimi neznankami: $m_2$, $m_3$, $w_{12}$, $w_{22}$ in $w_{42}$. Iz enačb 3, 4 in 6 izrazimo masne deleže $w_{12}$, $w_{22}$ in $w_{42}$.

$w_{12} = 1 – w_{11} = 1 – 0{,}1 = \mathbf{0{,}9}$

$w_{22} = 1 – w_{21} = 1 – 0{,}2 = \mathbf{0{,}8}$

$w_{12} = 1 – w_{41} = 1 – 0{,}13 = \mathbf{0{,}87}$

Iz enačbe 1 izrazimo in izračunamo $m_2$:

$$m_2 = \frac{m_4 \cdot w_{41} - m_1 \cdot w_{11}}{w_{21}} = \frac{3000 \cdot 0{,}13 - 500 \cdot 0{,}1}{0{,}2} = \frac{390 - 50}{0{,}2} = \mathbf{1700\ kg}$$

Iz enačbe 2 izračunamo $m_3$:

$$m_3 = \frac{m_4 \cdot w_{42} - m_1 \cdot w_{12} - m_2 \cdot w_{22}}{w_{32}} = \frac{3000 \cdot 0{,}87 - 500 \cdot 0{,}9 - 1700 \cdot 0{,}8}{1} = \frac{2610 - 450 - 1360}{1}$$

$m_3$ = **800 kg**

Rezultat:
Da dobimo 3000 kg raztopine, ki vsebuje $w$(polimer) = 13 %, moramo zmešati 500 kg raztopine z $w$(polimer) = 10 %, 1700 kg raztopine z $w$(polimer) = 20 % in 800 kg topila.

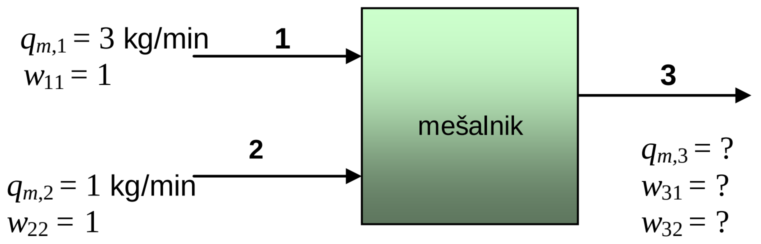
## 8. Naloga[3]:

V mešalniku zmešamo dva procesna tokova. V prvem toku se pretaka 3 kg/min benzena, v drugem pa 1 kg/min toluena. Določite pretok 3 in njegovo sestavo. Določite $N_s$ in $N_n$ !

------------------------------------------------------------------------------------------------------------

**Rešitev:**

Narišimo procesno shemo!




benzen - 1
toluen - 2

1. Enačbe in omejitve:

a) Masna bilanca:

benzen: $q_{m,1} \cdot w_{11} = q_{m,3} \cdot w_{31}$ (1)

toluen: $q_{m,2} \cdot w_{22} = q_{m,3} \cdot w_{32}$ (2)

b) Omejitve za masne deleže:

tok 1: $\cancel{w_{11} = 1}$ (3)

tok 2: $\cancel{w_{22} = 1}$ (4)

tok 3: $w_{31} + w_{32} = 1$ (5)

Ker sta v toku 1 in 2 čisti komponenti benzen oziroma toluen, sta masna deleža znana in lahko enačbi 3 in 4 črtamo.

c) Omejitve za modelne parametre: jih ni!

2. Število spremenljivk:

Ker obe komponenti nista prisotni v vseh tokovih, spremenljivke preštejemo. $N_s = 7$.

3. Število načrtovalnih spremenljivk:

$N_n = N_s - N_e = 7 - 3 = 4$

Poznati moramo vrednosti štirih spremenljivk in sicer so to:

$q_{m,1} = 3$ kg/min
$q_{m,2} = 1$ kg/min
$w_{11} = 1$
$w_{22} = 1$

4. Potek reševanja:

Ostanejo 3 enačbe s tremi neznankami: $q_{m,3}$, $w_{31}$ in $w_{32}$. Če enačbi 1 in 2 seštejemo, dobimo naslednjo zvezo:

$$q_{m,1} \cdot w_{11} + q_{m,2} \cdot w_{22} = q_{m,3} \cdot w_{31} + q_{m,3} \cdot w_{32}$$

$$q_{m,1} \cdot 1 + q_{m,2} \cdot 1 = q_{m,3} (w_{31} + w_{32})$$

Ker je $w_{31} + w_{32} = 1$ velja:

$$q_{m,1} + q_{m,2} = q_{m,3}$$

$$3 + 1 = q_{m,3}$$

$$q_{m,3} = \mathbf{4\ kg/min}$$

Iz enačbe 1 izrazimo in izračunamo $w_{31}$:

$$q_{m,1} \cdot w_{11} = q_{m,3} \cdot w_{31}$$

$$w_{31} = \frac{q_{m,1} \cdot w_{11}}{q_{m,3}} = \frac{3 \cdot 1}{4} = \mathbf{0{,}75}$$

Iz enačbe 5 izračunamo $w_{32}$:

$$w_{32} = 1 - w_{31} = 1 - 0{,}75 = \mathbf{0{,}25}$$

Preglednica z rezultati:

| Tok št. | $q_m$ / (kg/min) | $w$ / – | |
|---|---|---|---|
| | | benzen | toluen |
| 1 | 3 | 1 | - |
| 2 | 1 | - | 1 |
| 3 | 4 | 0,75 | 0,25 |

**9. Naloga[3]:**

Eksperiment je pokazal, da potrebujejo nekateri organizmi za svojo rast vlažen zrak obogaten s kisikom. V vlažilno komoro vtekajo trije procesni tokovi: voda, zrak in čisti kisik. Po mešanju teh tokov izteka iz komore tok želene sestave. Izračunajte potrebno množino zraka in kisika ter izhodno sestavo ter množino snovi. Določite $N_S$ in $N_n$ !

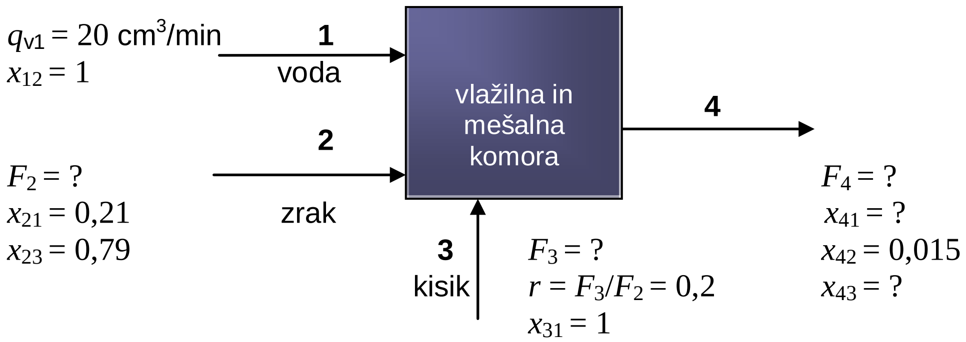
Na voljo so naslednji podatki:

- vtok vode je $q_V = 20\ cm^3/min$,
- sestava zraka je: $x(N_2) = 79\ \%$, $x(O_2) = 21\ \%$,
- razmerje med tokom kisika in zraka znaša $r = F_3/F_2 = 0{,}2$ ,
- na iztoku izmerjena vsebnost vode znaša $x(H_2O) = 1{,}5\ \%$.

---

**Rešitev:**

Narišimo shemo procesa in določimo procesne spremenljivke.




kisik - 1
voda - 2
dušik - 3

Preden postavimo enačbe množinske bilance, preračunajmo pretok $q_{v1}$ (pretok vode) na množinsko osnovo. Predpostavimo, da je $\rho(H_2O) = 1$ g/cm$^3$, $M(H_2O) = 18$ g/mol.

$$F_1 = \frac{20\ \text{cm}^3}{\text{min}} \left| \frac{1\ \text{g}}{\text{cm}^3} \right| \frac{\text{mol}}{18\ \text{g}} = 1{,}111\ \frac{\text{mol}}{\text{min}}$$

1. Enačbe in omejitve:

a) Množinska bilanca:

kisik: $F_2 \cdot x_{21} + F_3 \cdot x_{31} = F_4 \cdot x_{41}$ (1)

voda: $F_1 \cdot x_{12} = F_4 \cdot x_{42}$ (2)

dušik: $F_2 \cdot x_{23} = F_4 \cdot x_{43}$ (3)

b) Omejitve za množinske deleže:

$\cancel{x_{12} = 1}$ (4)

$\cancel{x_{21} + x_{23} = 1}$ (5)

$\cancel{x_{31} = 1}$ (6)

$x_{41} + x_{42} + x_{43} = 1$ (7)

V tokovih 1 in 3 sta čisti komponenti (voda v toku 1 in kisik v toku 3) zato je delež ene in druge komponente enak ena. Prav tako je znana sestava toka 2. Ker so torej deleži komponent v tokovih 1, 2 in 3 znani, lahko enačbe 4 – 6 črtamo.

c) Omejitve za modelne parametre:

$$F_3 = r \cdot F_2 = 0{,}2 \cdot F_2 \qquad (8)$$

2. Število spremenljivk:

Ker vse komponente niso prisotne v vseh tokovih, spremenljivke preštejemo.

$N_s = 12$

(štirje tokovi: $F_1$, $F_2$, $F_3$ in $F_4$, sedem množinskih deležev: $x_{12}$, $x_{21}$, $x_{23}$, $x_{31}$, $x_{41}$, $x_{42}$ in $x_{43}$ ter ena omejitev: $r$)

3. Število načrtovalnih spremenljivk:

$N_n = N_s - N_e = 12 - 5 = 7$

Načrtovalne spremenljivke in njihove vrednosti so:

$F_1 = 1{,}111$ mol/min
$x_{12} = 1$
$x_{21} = 0{,}21$
$x_{23} = 0{,}79$
$x_{31} = 1$
$x_{42} = 0{,}015$
$r = 0{,}2$

4. Potek reševanja:

Ostane 5 enačb (en. 1, 2, 3, 7 in 8) s petimi neznankami ($F_2$, $F_3$, $F_4$, $x_{41}$ in $x_{43}$).

Iz enačbe 2 izračunamo $F_4$:

$$F_4 = \frac{F_1 \cdot x_{12}}{x_{42}} = \frac{1{,}111 \cdot 1}{0{,}015} = \mathbf{74{,}07\ \frac{mol}{min}}$$

Enačbi 1 in 3 seštejemo:

$$F_2 \cdot x_{21} + F_3 \cdot x_{31} + F_2 \cdot x_{23} = F_4 \cdot x_{41} + F_4 \cdot x_{43}$$

$$F_2 \cdot x_{21} + 0{,}2 \cdot F_2 \cdot x_{31} + F_2 \cdot x_{23} = F_4 \,(x_{41} + x_{43})$$

Ker velja: $x_{41} + x_{43} = 1 - x_{42}$, lahko zapišemo:

$$F_2 \,(x_{21} + 0{,}2 \cdot x_{31} + x_{23}) = F_4 \,(1 - x_{42})$$

in dalje:

$$F_2 = \frac{F_4(1-x_{42})}{(x_{21}+0{,}2\cdot x_{31}+x_{23})} = \frac{74{,}07(1-0{,}015)}{0{,}21+0{,}2\cdot 1+0{,}79} = \frac{72{,}96}{1{,}2} = \mathbf{60{,}8}\ \frac{\mathbf{mol}}{\mathbf{min}}$$

Iz enačbe 8 izračunamo $F_3$:

$$F_3 = 0{,}2 \cdot F_2 = 0{,}2 \cdot 60{,}8 = \mathbf{12{,}16}\ \frac{\mathbf{mol}}{\mathbf{min}}$$

Iz enačbe 3 izračunamo $x_{43}$:

$$x_{43} = \frac{F_2 \cdot x_{23}}{F_4} = \frac{60{,}8\cdot 0{,}79}{74{,}07} = \mathbf{0{,}648}$$

In končno iz enačbe 7 izračunamo delež kisika, $x_{41}$:

$$x_{41} = 1 - x_{42} - x_{43} = 1 - 0{,}015 - 0{,}648 = \mathbf{0{,}337}$$

Rezultate podamo v preglednici:

| Tok št. | $F$ / (mol/min) | $x$ / – | | |
|---|---|---|---|---|
| | | kisik | voda | dušik |
| 1 | 1,111 | - | 1 | - |
| 2 | 60,80 | 0,21 | - | 0,79 |
| 3 | 12,16 | 1 | - | - |
| 4 | 74,07 | 0,337 | 0,015 | 0,648 |

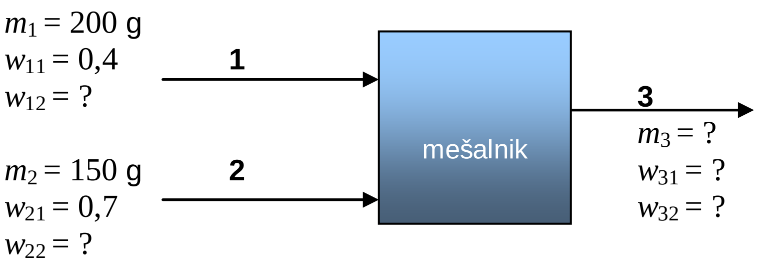
**10. Naloga[3]:**

Na voljo imamo dve raztopini metanol/voda različnih koncentracij. Prva raztopina vsebuje $w$(metanol) = 40 %, druga pa $w$(metanol) = 70 %. Izračunajte maso in končno koncentracijo dobljene raztopine, če zmešamo 200 g prve in 150 g druge raztopine!

---

**Rešitev:**

Narišimo poenostavljeno procesno shemo:




metanol - 1
voda - 2

1. Enačbe in omejitve:

a) Masna bilanca:

metanol: $m_1 \cdot w_{11} + m_2 \cdot w_{21} = m_3 \cdot w_{31}$ (1)

voda: $m_1 \cdot w_{12} + m_2 \cdot w_{22} = m_3 \cdot w_{32}$ (2)

b) Omejitve za masne deleže:

tok 1: $w_{11} + w_{12} = 1$ (3)

tok 2: $w_{21} + w_{22} = 1$ (4)

tok 3: $w_{31} + w_{32} = 1$ (5)

c) Omejitve za modelne parametre: jih ni!

2. Število spremenljivk:

Ker sta obe komponenti prisotni v vseh tokovih, velja naslednja zveza:

$$N_s = N_t\,(N_k + 1) + N_p = 3\,(2 + 1) + 0 = 9$$

3. Število načrtovalnih spremenljivk:

$$N_n = N_s - N_e = 9 - 5 = 4$$

Načrtovalne spremenljivke in njihove vrednosti so:

$m_1 = 200$ g
$m_2 = 150$ g
$w_{11} = 0,4$
$w_{21} = 0,7$

4. Potek reševanja:

Iz enačbe 3 izrazimo in izračunamo delež vode v prvi raztopini, $w_{12}$:

$$w_{12} = 1 - w_{11} = 1 - 0{,}4 = \mathbf{0{,}6}$$

Iz enačbe 4 izračunamo delež vode v drugi raztopini, $w_{22}$:

$$w_{22} = 1 - w_{21} = 1 - 0{,}7 = \mathbf{0{,}3}$$

Enačbi 1 in 2 seštejemo:

$$m_1 \cdot w_{11} + m_2 \cdot w_{21} + m_1 \cdot w_{12} + m_2 \cdot w_{22} = m_3 \cdot w_{31} + m_3 \cdot w_{32}$$

$$m_1\,(w_{11} + w_{12}) + m_2\,(w_{21} + w_{22}) = m_3\,(w_{31} + w_{32})$$

Ker je vsota deležev komponent v vsakem toku enaka ena, velja:

$$m_1 + m_2 = m_3$$

$$m_3 = 200 + 150 = \mathbf{350\ g}$$

Iz enačbe 1 izrazimo in izračunamo $w_{31}$:

$$w_{31} = \frac{m_1 \cdot w_{11} + m_2 \cdot w_{21}}{m_3} = \frac{200 \cdot 0{,}4 + 150 \cdot 0{,}7}{350} = \mathbf{0{,}529}$$

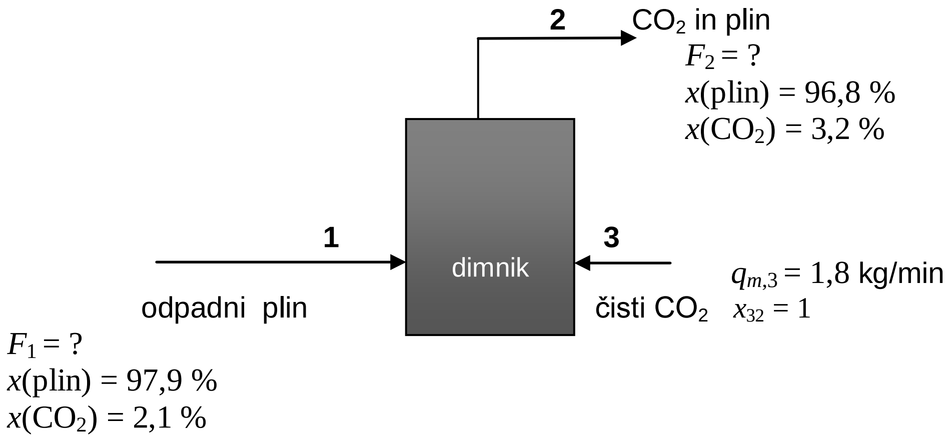
Iz enačbe 5 izračunamo $w_{32}$:

$$w_{32} = 1 - w_{31} = 1 - 0{,}529 = \mathbf{0{,}471}$$

Rezultat:
Po mešanju razpoložljivih raztopin dobimo 350 g raztopine z masnima deležema $w$(metanol) = 0,529 in $w$(voda) = 0,471.

**11. Naloga:**

V dimnik vtekata odpadni plin in $CO_2$ in izteka mešanica obeh. Množina in sestava sta razvidni iz procesne sheme. Vtok čistega $CO_2$ v toku 3 znaša 1,8 kg/min. Izračunajte, koliko odpadnega plina vteka v dimnik in kolikšen je pretok 2!




-----------------------------------------------------------------------------------------------------------

**Rešitev:**

V procesu sta dve komponenti:

plin - 1
$CO_2$ - 2

Najprej preračunamo masni pretok čistega $CO_2$ v množinski pretok. Tako bo ves izračun potekal na množinski osnovi.

$$F_3 = \frac{q_{m,3}}{M(CO_2)} = \frac{1{,}8\ \text{kg kmol}}{\text{min} \cdot 44\ \text{kg}} = 0{,}041\ \frac{\text{kmol}}{\text{min}}$$

1. Enačbe in omejitve:

a) Množinska bilanca:

plin: $F_1 \cdot x_{11} = F_2 \cdot x_{21}$ (1)

$CO_2$: $F_1 \cdot x_{12} + F_3 \cdot x_{32} = F_2 \cdot x_{22}$ (2)

b) Omejitve za množinske deleže:

$\cancel{x_{11} + x_{12} = 1}$ (3)

$\cancel{x_{21} + x_{22} = 1}$ (4)

$\cancel{x_{32} = 1}$ (5)

Ker so deleži komponent v vseh tokovih znani, lahko enačbe 3 – 5 črtamo.

c) Omejitve za modelne parametre: jih ni!

2. Število spremenljivk:

Ker obe komponenti nista prisotni v vseh tokovih, spremenljivke preštejemo.

$N_\mathrm{s} = 8$

3. Število načrtovalnih spremenljivk:

$N_\mathrm{n} = N_\mathrm{s} - N_\mathrm{e} = 8 - 2 = 6$

Načrtovalne spremenljivke in njihove vrednosti so:

$F_3 = 0{,}041$ kmol/min
$x_{11} = 0{,}979$
$x_{12} = 0{,}021$
$x_{21} = 0{,}968$
$x_{22} = 0{,}032$
$x_{32} = 1$

4. Potek reševanja:

Ostali sta dve enačbi (en. 1 in 2) z dvema neznankama ($F_1$ in $F_2$). Iz enačbe 1 izrazimo $F_2$:

$$F_2 = \frac{F_1 \cdot x_{11}}{x_{21}}$$

Izraz vstavimo v enačbo 2:

$$F_1 \cdot x_{12} + F_3 \cdot x_{32} = \frac{F_1 \cdot x_{11}}{x_{21}} \cdot x_{22}$$

$$F_3 \cdot x_{32} = \frac{F_1 \cdot x_{11}}{x_{21}} \cdot x_{22} - F_1 \cdot x_{12} = F_1 \cdot \left( \frac{x_{11} \cdot x_{22}}{x_{21}} - x_{12} \right)$$

Edina neznanka je $F_1$:

$$F_1 = \frac{F_3 \cdot x_{32}}{\frac{x_{11} \cdot x_{22}}{x_{21}} - x_{12}} = \frac{0{,}041\ \frac{\text{kmol}}{\text{min}} \cdot 1}{\frac{0{,}979 \cdot 0{,}032}{0{,}968} - 0{,}021} = \frac{0{,}041\ \frac{\text{kmol}}{\text{min}}}{0{,}01136} = \mathbf{3{,}6\ \frac{kmol}{min}}$$

Sedaj izračunajmo $F_2$:

$$F_2 = \frac{F_1 \cdot x_{11}}{x_{21}} = \frac{3{,}6 \cdot 0{,}979}{0{,}968} = \mathbf{3{,}641\ \frac{kmol}{min}}$$

Preglednica z rezultati:

| Tok št. | $F$ / (kmol/min) | $x$ / – | |
|---|---|---|---|
| | | plin | $CO_2$ |
| 1 | 3,6 | 0,979 | 0,021 |
| 2 | 3,641 | 0,968 | 0,032 |
| 3 | 0,041 | - | 1 |

## LITERATURA


1. Himmelblau D. M., Basic Principles and Calculations in Chemical Engineering, Sixth Edition, Prentice-Hall PTR, New Jersey,1996.
2. Himmelblau D. M., Supplementary Problems for Basic Principles and Calculations in Chemical Engineering, Sixth Edition, The University of Texas, 1996.
3. Felder R. M., Rousseau R. W., Elementary Principles of Chemical Processes, John Wiley&Sons, New York, 1978.

# 3. Masne bilance sistemov procesnih enot brez kemijske reakcije

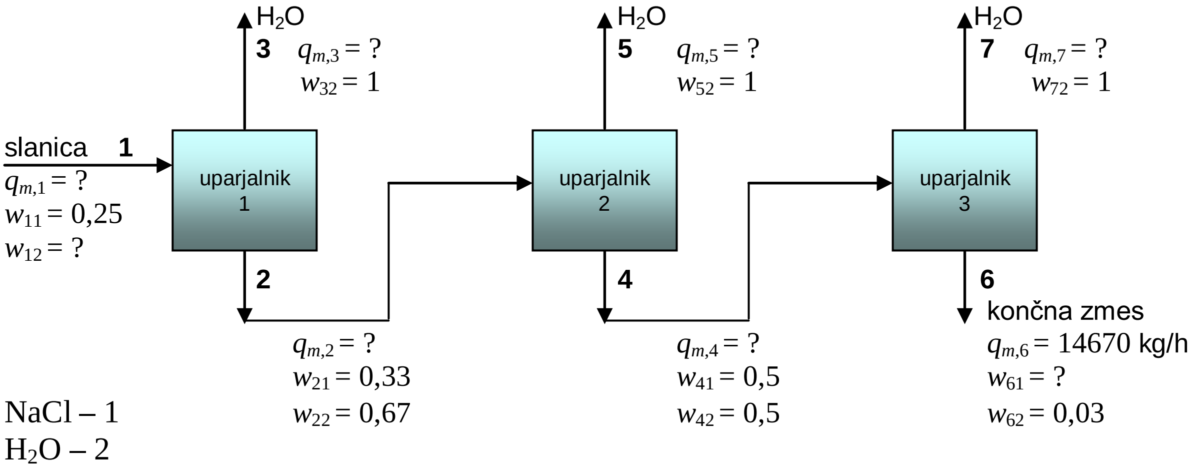
**1. Naloga[1]:**

Tristopenjski uparjalnik je načrtovan za odstranjevanje vode iz napajalne slanice ($NaCl$ + $H_2O$) v kateri je $w$ = 25 % NaCl. Zmes iz tretjega uparjalnika naj bi vsebovala $w$ = 3 % $H_2O$. Če je iztok zmesi iz tretjega uparjalnika 14670 kg/h, določite:

a) vtok slanice, $q_{m,1}$, in

b) količino odstranjene vode iz vsakega uparjalnika ($q_{m,3}$, $q_{m,5}$ in $q_{m,7}$).

Ostali podatki so razvidni iz procesne sheme.




------------------------------------------------------------------------------------------------------------

<u>**Rešitev:**</u>

<u>1. Enačbe in omejitve:</u>

<u>a) Enačbe za masno bilanco:</u>

**uparjalnik 1:**

NaCl: $q_{m,1} \cdot w_{11} = q_{m,2} \cdot w_{21}$ (1)

$H_2O$: $q_{m,1} \cdot w_{12} = q_{m,2} \cdot w_{22} + q_{m,3} \cdot w_{32}$ (2)

**uparjalnik 2:**

NaCl: $q_{m,2} \cdot w_{21} = q_{m,4} \cdot w_{41}$ (3)

$H_2O$: $q_{m,2} \cdot w_{22} = q_{m,5} \cdot w_{52} + q_{m,4} \cdot w_{42}$ (4)

**uparjalnik 3:**

NaCl: $q_{m,4} \cdot w_{41} = q_{m,6} \cdot w_{61}$ (5)

$H_2O$: $q_{m,4} \cdot w_{42} = q_{m,6} \cdot w_{62} + q_{m,7} \cdot w_{72}$ (6)

b) Omejitve za množinske deleže: Ker so v vseh tokovih, razen v toku 1 in 6, znani deleži obeh komponent, sta omejitvi:

tok 1: $w_{11} + w_{12} = 1$ (7)
tok 6: $w_{61} + w_{62} = 1$ (8)

c) Omejitve za modelne parametre: jih ni!

2. Število spremenljivk:

Ker ni v vseh tokovih obeh komponent, jih preštejemo: $N_\mathrm{s}$=18

3. Število načrtovalnih spremenljivk:

$N_\mathrm{n} = N_\mathrm{s} - N_\mathrm{e} = 18 - 8 = 10$

Načrtovalne spremenljivke so naslednje: $w_{11}$, $w_{21}$, $w_{22}$, $w_{32}$, $w_{41}$, $w_{42}$, $w_{52}$, $w_{62}$, $w_{72}$ in $q_{m,6}$. Vrednosti so:

$w_{11} = 0{,}25$
$w_{21} = 0{,}33$
$w_{22} = 0{,}67$
$w_{32} = 1$
$w_{41} = 0{,}5$
$w_{42} = 0{,}5$
$w_{52} = 1$
$w_{62} = 0{,}03$
$w_{72} = 1$
$q_{m,6} = 14670$ kg/h.

4. Potek reševanja:

Iz enačb 7 do 8 izračunamo $w_{12}$ in $w_{61}$.

$w_{12} = 1 - w_{11} = 1 - 0{,}25 = 0{,}75$
$w_{61} = 1 - w_{62} = 1 - 0{,}03 = 0{,}97$

Ostane šest enačb s šestimi neznankami: $q_{m,1}$, $q_{m,2}$, $q_{m,3}$, $q_{m,4}$, $q_{m,5}$ in $q_{m,7}$.

Iz enačbe 5 izračunamo $q_{m,4}$:

$$q_{m,4} = \frac{q_{m,6} \cdot w_{m,61}}{w_{m,41}} = \frac{14670 \cdot 0{,}97}{0{,}5} = \mathbf{28460}\ \frac{\mathbf{kg}}{\mathbf{h}}$$

Iz enačbe 6 izračunamo $q_{m,7}$:

$$q_{m,7} = \frac{q_{m,4} \cdot w_{m,42} - q_{m,6} \cdot w_{62}}{w_{72}} = \frac{28460 \cdot 0{,}5 - 14670 \cdot 0{,}03}{1} = \mathbf{13790}\ \frac{\mathbf{kg}}{\mathbf{h}}$$

Iz enačbe 3 izračunamo $q_{m,2}$:

$$q_{m,2} = \frac{q_{m,4} \cdot w_{41}}{w_{21}} = \frac{28460 \cdot 0{,}5}{0{,}33} = \mathbf{43121}\ \frac{\mathbf{kg}}{\mathbf{h}}$$

Iz enačbe 1 izračunamo $q_{m,1}$:

$$q_{m,1} = \frac{q_{m,2} \cdot w_{21}}{w_{11}} = \frac{43121 \cdot 0{,}33}{0{,}25} = \mathbf{56920}\ \frac{\mathbf{kg}}{\mathbf{h}}$$

Iz enačbe 2 izračunamo $q_{m,3}$:

$$q_{m,3} = \frac{q_{m,1} \cdot w_{12} - q_{m,2} \cdot w_{22}}{w_{32}} = \frac{56920 \cdot 0{,}75 - 43121 \cdot 0{,}67}{1} = \mathbf{13799}\ \frac{\mathbf{kg}}{\mathbf{h}}$$

Iz enačbe 4 izračunamo $q_{m,5}$:

$$q_{m,5} = \frac{q_{m,2} \cdot w_{22} - q_{m,4} \cdot w_{42}}{w_{52}} = \frac{43121 \cdot 0{,}67 - 28460 \cdot 0{,}5}{1} = \mathbf{14661}\ \frac{\mathbf{kg}}{\mathbf{h}}$$

Rezultate prikažemo v preglednici:

| Tok št. | $q_m$ / (kg/h) | $w$ / - | |
|---|---|---|---|
| | | NaCl | $H_2O$ |
| 1 | 56 920 | 0,25 | 0,75 |
| 2 | 43 121 | 0,33 | 0,67 |
| 3 | 13 799 | - | 1 |
| 4 | 28 460 | 0,5 | 0,5 |
| 5 | 14 661 | - | 1 |
| 6 | 14 670 | 0,97 | 0,03 |
| 7 | 13 790 | - | 1 |

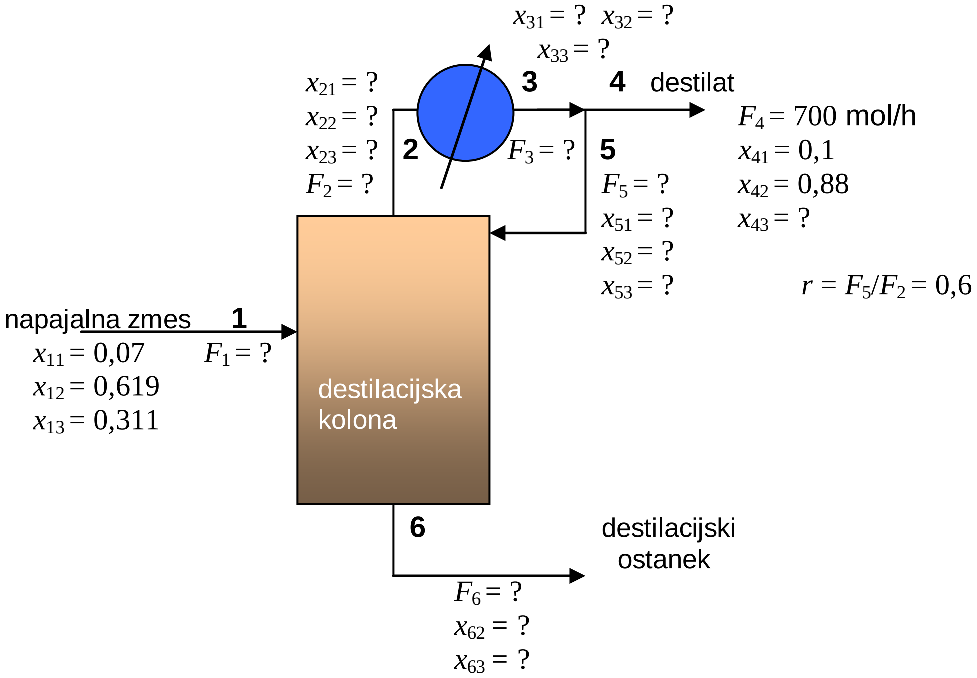
Preverimo masno bilanco celotnega procesa:

$q_{m,1} = q_{m,3} + q_{m,5} + q_{m,6} + q_{m,7}$

$$56\,920\ \frac{\text{kg}}{\text{h}} = 13\,799 + 14\,661 + 14\,670 + 13\,790 = 56\,920\ \frac{\text{kg}}{\text{h}}$$

## 2. Naloga[2]:

Destilacijska (rektifikacijska) kolona se uporablja za ločevanje zmesi komponent na osnovi različnih hlapnosti. V koloni, prikazani na sliki, ločujemo trikomponentno mešanico aceton/ocetna kislina/acetanhidrid. Napajalna zmes ima naslednjo sestavo: $x$(aceton) = 7 %, $x$(ocetna k.) = 61,9 % in $x$(acetanhidrid) = 31,1 %. V destilacijskem ostanku sta prisotna samo ocetna kislina in acetanhidrid. Sestava destilata je naslednja: $x$(aceton) = 10 %, $x$(ocetna k.) = 88 %. Izračunajte masno bilanco kolone, če predpostavimo, da pride v kondenzatorju do fazne spremembe (plin se utekočini), pri čemer se sestava in pretok ne spremenita. Željeno kvaliteto destilata dobimo, če je razmerje med tokom 5 in 2 enako 0,6. Proizvedemo 700 mol/h destilata.




aceton - 1
ocetna kislina - 2
acetanhidrid - 3

----------------------------------------------------------------------------------------------------

<u>Rešitev:</u>

<u>1. Enačbe in omejitve:</u>

<u>a) Enačbe za masno bilanco:</u>

**kolona:**

aceton: $F_1 \cdot x_{11} + F_5 \cdot x_{51} = F_2 \cdot x_{21}$ (1)

ocetna kislina: $F_1 \cdot x_{12} + F_5 \cdot x_{52} = F_2 \cdot x_{22} + F_6 \cdot x_{62}$ (2)

acetanhidrid: $F_1 \cdot x_{13} + F_5 \cdot x_{53} = F_2 \cdot x_{23} + F_6 \cdot x_{63}$ (3)

(ali: $F_1 + F_5 = F_2 + F_6$)

**kondenzator:**

aceton: $F_2 \cdot x_{21} = F_3 \cdot x_{31}$ (4)

$x_{21} = x_{31}$ (5)

$x_{22} = x_{32}$ (6)

(ali: $F_2 = F_3$)

**razcepišče:**

aceton: $F_3 \cdot x_{31} = F_4 \cdot x_{41} + F_5 \cdot x_{51}$ (7)

$x_{31} = x_{41}$ (8)

$x_{32} = x_{42}$ (9)

$x_{51} = x_{41}$ (10)

$x_{52} = x_{42}$ (11)

(ali: $F_3 = F_4 + F_5$)

b) Omejitve za množinske deleže:

tok 1: $\cancel{x_{11} + x_{12} + x_{13} = 1}$ (12)
tok 2: $x_{21} + x_{22} + x_{23} = 1$ (13)
tok 3: $x_{31} + x_{32} + x_{33} = 1$ (14)
tok 4: $x_{41} + x_{42} + x_{43} = 1$ (15)
tok 5: $x_{51} + x_{52} + x_{53} = 1$ (16)
tok 6: $x_{62} + x_{63} = 1$ (17)

Ker je sestava toka 1 znana, enačbo 12 črtamo.

c) Omejitve za modelne parametre: $r = \frac{F_5}{F_2} = 0{,}6$ (18)

2. Število spremenljivk: $N_s = 24$

3. Število načrtovalnih spremenljivk:

$N_n = N_s - N_e = 24 - 17 = 7$

Načrtovalne spremenljivke so naslednje: $x_{11}$, $x_{12}$, $x_{13}$, $x_{41}$, $x_{42}$, $F_4$, $r$). Vrednosti so:

$x_{11} = 0{,}07$
$x_{12} = 0{,}619$
$x_{13} = 0{,}311$
$x_{41} = 0{,}1$
$x_{42} = 0{,}88$
$F_4 = 700$ mol/h
$r = 0{,}6$

4. Potek reševanja:

Iz enačb 8, 9, 10 in 11 izračunamo množinske deleže komponent:

$x_{31} = x_{41} = 0{,}1$
$x_{32} = x_{42} = 0{,}88$
$x_{51} = x_{41} = 0{,}1$
$x_{52} = x_{42} = 0{,}88$

Iz enačb 5 in 6 izračunamo:

$x_{21} = x_{31} = 0{,}1$
$x_{22} = x_{32} = 0{,}88$

Iz enačb 13, 14, 15 in 16 izračunamo:

$x_{23} = 1 - x_{21} - x_{22} = 1 - 0{,}1 - 0{,}88 = 0{,}02$
$x_{33} = 1 - x_{31} - x_{32} = 1 - 0{,}1 - 0{,}88 = 0{,}02$
$x_{43} = 1 - x_{41} - x_{42} = 1 - 0{,}1 - 0{,}88 = 0{,}02$
$x_{53} = 1 - x_{51} - x_{52} = 1 - 0{,}1 - 0{,}88 = 0{,}02$

Iz enačbe 18 je razvidno, da je:

$F_5 = 0{,}6 \cdot F_2$ oz.

$$F_2 = \frac{F_5}{0{,}6}$$

in ker velja:

$F_2 = F_3$ velja tudi

$$F_3 = \frac{F_5}{0{,}6}$$

in dalje:

$F_5 = F_3 \cdot 0{,}6$

Izraz vstavimo v enačbo 7 in izračunamo $F_3$:

$F_3 \cdot x_{31} = F_4 \cdot x_{41} + F_3 \cdot 0{,}6 \cdot x_{51}$
$F_3 \cdot (x_{31} - 0{,}6 \cdot x_{51}) = F_4 \cdot x_{41}$

$$F_3 = \frac{F_4 \cdot x_{41}}{(x_{31} - 0{,}6 \cdot x_{51})} = \frac{700 \cdot 0{,}1}{(0{,}1 - 0{,}6 \cdot 0{,}1)} = \frac{70}{0{,}04} = \mathbf{1750}\ \frac{\textbf{mol}}{\textbf{h}}$$

Iz enačbe masne bilance kondenzatorja izračunamo $F_2$:

$$F_2 = F_3 = \mathbf{1750}\ \frac{\textbf{mol}}{\textbf{h}}$$

Sedaj lahko izračunamo $F_5$:

$$F_5 = F_3 \cdot 0{,}6 = 1750 \cdot 0{,}6 = \mathbf{1050}\ \frac{\textbf{mol}}{\textbf{h}}$$

Iz enačbe 1 izračunamo $F_1$:

$$F_1 = \frac{F_2 \cdot x_{21} - F_5 \cdot x_{51}}{x_{11}} = \frac{1750 \cdot 0{,}1 - 1050 \cdot 0{,}1}{0{,}07} = \mathbf{1000} \ \frac{\mathbf{mol}}{\mathbf{h}}$$

Iz celotne masne bilance kolone izračunamo $F_6$:

$$F_6 = F_1 + F_5 - F_2 = 1000 + 1050 - 1750 = \mathbf{300} \ \frac{\mathbf{mol}}{\mathbf{h}}$$

Iz enačbe 2 izračunamo $x_{62}$:

$$x_{62} = \frac{F_1 \cdot x_{12} + F_5 \cdot x_{52} - F_2 \cdot x_{22}}{F_6} = \frac{1000 \cdot 0{,}619 + 1050 \cdot 0{,}88 - 1750 \cdot 0{,}88}{300} = \mathbf{0{,}01}$$

Iz enačbe 17 izračunamo $x_{63}$:

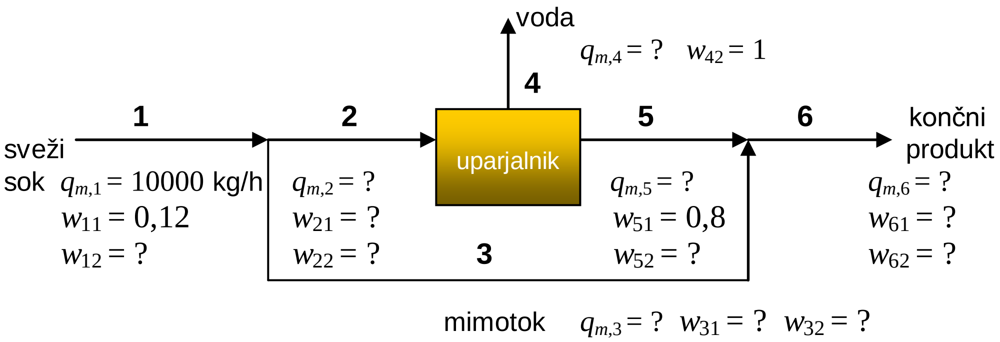
$x_{63} = 1 - x_{62} = 1 - 0{,}01 = 1 - 0{,}01 = \mathbf{0{,}99}$

Rezultate prikažemo v preglednici:

| Št. toka | *F* / (mol/h) | *x* / - | | |
|---|---|---|---|---|
| | | aceton | ocetna kislina | acetanhidrid |
| 1 | 1000 | 0,07 | 0,619 | 0,311 |
| 2 | 1750 | 0,10 | 0,880 | 0,020 |
| 3 | 1750 | 0,10 | 0,880 | 0,020 |
| 4 | 700 | 0,10 | 0,880 | 0,020 |
| 5 | 1050 | 0,10 | 0,880 | 0,020 |
| 6 | 300 | - | 0,010 | 0,990 |

## 3. Naloga[2]:

Sveži oranžni sok vsebuje približno $w$ = 12 % raztopljenih trdnih snovi predvsem sladkorjev v vodi. Da bi znižali stroške prevoza, sok koncentrirajo in ga na dostavnem mestu razredčijo. Koncentriranje se izvaja v uparjalnikih, ki obratujejo pri podtlaku. S tem preprečijo izgube hlapnih in toplotno občutljivih komponent. Ker se kljub temu ni mogoče izogniti malim izgubam, sok prekomerno koncentrirajo in naknadno dodajo manjše količine svežega soka. Predpostavimo, da 10 % vtoka svežega soka vodijo v mimotok ($\xi$ (mimotok, sveži vtok) = 0,1), preostalo količino pa v uparjalnik iz katerega izteka produkt, ki vsebuje 80 % raztopljenih trdnih delcev. Če je vtok svežega soka 10000 kg/h izračunajte tok izparjene vode in sestavo končnega produkta! Podatki so zbrani na procesni shemi.




$$\xi = \frac{q_{m,3}}{q_{m,1}} = 0,1$$

trdni delci – 1
voda – 2

-----------------------------------------------------------------------------------------------------------

**Rešitev:**

1. Enačbe in omejitve:

a) Enačbe masne bilance:

**razcepišče:**

trdni delci: $q_{m,1} \cdot w_{11} = q_{m,2} \cdot w_{21} + q_{m,3} \cdot w_{31}$ (1)
$w_{21} = w_{11}$ (2)
$w_{31} = w_{11}$ (3)
(ali: $q_{m,1} = q_{m,2} + q_{m,3}$)

**uparjalnik:**

trdni delci: $q_{m,2} \cdot w_{21} = q_{m,5} \cdot w_{51}$ (4)
voda: $q_{m,2} \cdot w_{22} = q_{m,4} \cdot w_{42} + q_{m,5} \cdot w_{52}$ (5)
(ali: $q_{m,2} = q_{m,4} + q_{m,5}$)

**stočišče:**

trdni delci: $q_{m,5} \cdot w_{51} + q_{m,3} \cdot w_{31} = q_{m,6} \cdot w_{61}$ (6)
voda: $q_{m,5} \cdot w_{52} + q_{m,3} \cdot w_{32} = q_{m,6} \cdot w_{62}$ (7)
(ali: $q_{m,5} + q_{m,3} = q_{m,6}$)

b) Omejitve za masne deleže:

tok 1: $w_{11} + w_{12} = 1$ (8)
tok 2: $w_{21} + w_{22} = 1$ (9)
tok 3: $w_{31} + w_{32} = 1$ (10)
tok 4: $\cancel{w_{42} = 1}$ (11)
tok 5: $w_{51} + w_{52} = 1$ (12)
tok 6: $w_{61} + w_{62} = 1$ (13)

Ker je sestava toka 4 znana, enačbo 11 črtamo.

c) Omejitve za modelne parametre:

$$q_{m,3} = 0,1 \cdot q_{m,1} \qquad (14)$$

2. Število spremenljivk:

$$N_s = 18$$

3. Število načrtovalnih spremenljivk:

$$N_n = N_s - N_e = 18 - 13 = 5$$

Načrtovalne spremenljivke in njihove vrednosti so:

$q_{m,1} = 10\,000$ kg/h
$w_{11} = 0,12$
$w_{42} = 1$
$w_{51} = 0,8$
$\xi$ (mimotok, sveži vtok) = 0,1

4. Potek reševanja:

Iz enačb 2 in 3 izračunamo:

$w_{21} = w_{11} = 0,12$
$w_{31} = w_{11} = 0,12$

Iz enačb 8, 9, 10 in 12 lahko izračunamo delež druge komponente:

$w_{12} = 1 - w_{11} = 1 - 0,12 = 0,88$
$w_{22} = 1 - w_{21} = 1 - 0,12 = 0,88$
$w_{32} = 1 - w_{31} = 1 - 0,12 = 0,88$
$w_{52} = 1 - w_{51} = 1 - 0,8 = 0,2$

Iz enačbe 14 izračunamo $q_{m,3}$:

$q_{m,3} = q_{m,1} \cdot 0,1 = 10\,000 \cdot 0,1 =$ **1000 kg/h**

Iz enačbe celotne bilance razcepišča izračunamo $q_{m,2}$:

$q_{m,2} = q_{m,1} - q_{m,3} = 10\,000 - 1000 =$ **9000 kg/h**

Iz enačbe 4 izračunamo $q_{m,5}$:

$$q_{m,5} = \frac{q_{m,2} \cdot w_{21}}{w_{51}} = \frac{9000 \cdot 0,12}{0,8} = \mathbf{1350\ \frac{kg}{h}}$$

Iz enačbe celotne bilance uparjalnika izračunamo $q_{m,4}$:

$q_{m,4} = q_{m,2} - q_{m,5} = 9000 - 1350 =$ **7650 kg/h**

Iz enačb celotne bilance stočišča izračunamo $q_{m,6}$:

$q_{m,6} = q_{m,5} + q_{m,3} = 1350 + 1000 =$ **2350 kg/h**

Iz enačbe 6 izračunamo $w_{61}$:

$$w_{61} = \frac{q_{m,5} \cdot w_{51} + q_{m,3} \cdot w_{31}}{q_{m,6}} = \frac{1350 \cdot 0{,}8 + 1000 \cdot 0{,}12}{2350} = \mathbf{0{,}510}$$

Iz enačbe 13 izračunamo $w_{62}$:

$w_{62} = 1 - w_{61} = 1 - 0{,}51 =$ **0,49**

Rezultate prikažemo v preglednici:

| Tok št. | $q_m$ / (kg/h) | $w$ / - | |
|---|---|---|---|
| | | trdni delci | voda |
| 1 | 10 000 | 0,12 | 0,88 |
| 2 | 9 000 | 0,12 | 0,88 |
| 3 | 1 000 | 0,12 | 0,88 |
| 4 | 7 650 | - | 1 |
| 5 | 1 350 | 0,8 | 0,2 |
| 6 | 2 350 | 0,51 | 0,49 |

Preverimo celotno masno bilanco procesa:

$q_{m,1} = q_{m,4} + q_{m,6}$

10 000 kg/h = 7650 kg/h + 2350 kg/h
10 000 kg/h = 10 000 kg/h

Kot vidimo masna bilanca velja.

## LITERATURA

1. Himmelblau D. M., Supplementary Problems for Basic Principles and Calculations in Chemical Engineering, 6th Edition, The Univesity of Texas, 1996.
2. Reklaitis G. V., Introduction to Material and Energy Balances, John Wiley&Sons, New York, 1983.

# 4. Masne bilance za kemijske reaktorje

**1. Naloga[1]:**

Z oksidacijo etena  proizvajamo etenoksid po naslednji reakciji:

$$2\ C_2H_4 + O_2 \rightarrow 2\ C_2H_4O$$

Vtok v reaktor je 100 kmol/h etena in 100 kmol/h kisika. Določite:

a) Kateri reaktant je ključni reaktant?
b) Kakšen je delež  prebitka prebitnega reaktanta?
c) Koliko prebitnega reaktanta ostane nezreagiranega in koliko nastane $C_2H_4O$, če reakcija poteče popolnoma (100 % stopnja presnove ključnega reaktanta),?
d) Kakšna je sestava na iztoku iz reaktorja, če reakcija poteče s 50 % presnovo ključnega reaktanta?
e) Kakšna je stopnja presnove etena, če reakcija poteče do stopnje, kjer v produktu najdemo 60 kmol/h nezreagiranega $O_2$? Kakšna je stopnja presnove $O_2$?

Nalogo rešite z definiranjem enačb za masno bilanco na osnovi prisotnih kemijskih komponent.

---

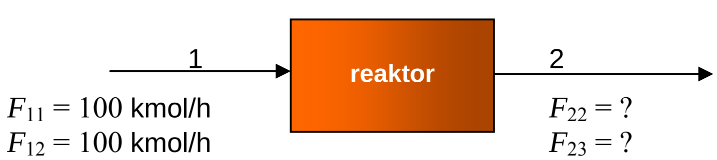
**Rešitev:**

a) **Ključni reaktant** je eten. Potrebni množinski tok kisika, pri danem pretoku etena, je 50 kmol/h (če bi reakcija potekla do konca).

b) **Delež prebitnega reaktanta** tj. kisika:

$$\Delta x_{O_2} = \frac{100\ \frac{\text{kmol}}{\text{h}} - 50\ \frac{\text{kmol}}{\text{h}}}{50\ \frac{\text{kmol}}{\text{h}}} = \mathbf{1} \text{ ali } \mathbf{100\%} \text{ prebitek}$$

c) **100 % stopnja presnove ključnega reaktanta:**



$C_2H_4$ – 1
$O_2$ – 2
$C_2H_4O$ – 3

$$X_{C_2H_4} = \frac{F_{11} - F_{21}}{F_{11}} = 1$$

Če je presnova etena 100 %, ves zreagira in ga ne najdemo v iztoku iz reaktorja. Zato velja: $F_{21} = 0$ .

Množine komponent na iztoku iz reaktorja lahko izračunamo iz enačbe masne bilance za posamezne komponente:

Splošni izraz:

$$\sum_{i=1}^{N_t} F_i x_{ij} + \omega \cdot \nu_j = 0 \qquad j = 1, 2 \ldots, N_k$$

$N_t$ – število tokov
$i$ – številka toka

Za vsako komponento lahko torej zapišemo:

$$F_{11} - F_{21} + \omega \cdot \nu_1 = 0 \qquad (1)$$

$$F_{12} - F_{22} + \omega \cdot \nu_2 = 0 \qquad (2)$$

$$F_{13} - F_{23} + \omega \cdot \nu_3 = 0 \qquad (3)$$

Na iztoku v tem primeru ni etena ($F_{21} = 0$), na vtoku ni etenoksida ($F_{13} = 0$).

Iz enačbe 1 izračunamo hitost presnove, $\omega$:

$$\omega \cdot \nu_1 = -F_{11}$$

$$\omega = \frac{-F_{11}}{\nu_1} = \frac{-100 \ \frac{\text{kmol}}{\text{h}}}{-2} = 50 \ \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Iz enačbe 2 izračunamo množinski tok kisika, $F_{22}$:

$$F_{12} + \omega \cdot \nu_2 = F_{22}$$

$$\boldsymbol{F_{22}} = 100 + 50 \cdot (-1) = \mathbf{50} \ \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Iz enačbe 3 izračunamo množinski tok etenoksida, $F_{23}$:

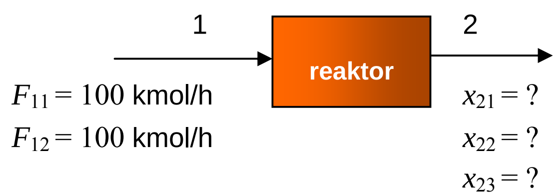
$$-F_{23} + \omega \cdot \nu_3 = 0$$

$$\omega \cdot \nu_3 = F_{23}$$

$$\boldsymbol{F_{23}} = 50 \cdot (2) = \mathbf{100}\ \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

<u>Rezultat</u>:
Pri reakciji nastane 100 kmol/h $C_2H_4O$, prav tako najdemo v iztoku iz reaktorja 50 kmol/h nezreagiranega kisika.

d) Kakšna je sestava iztoka, če je **stopnja presnove etena 50 %**?




$$X_{C_2H_4} = 0{,}5$$

$$\frac{F_{11} - F_{21}}{F_{11}} = 0{,}5$$

in dalje

$$0{,}5\ F_{11} = F_{11} - F_{21}$$

$$F_{21} = F_{11} - 0{,}5\ F_{11}$$
$$F_{21} = F_{11}(1 - 0{,}5)$$

$$\boldsymbol{F_{21}} = 100 \cdot 0{,}5 = \mathbf{50}\ \frac{\textbf{kmol}}{\textbf{h}}$$

Iz enačbe 1 (pod točko c) lahko izračunamo $\omega$. Hitrost reakcije je namreč v tem primeru manjša, saj v eni uri zreagira samo 50 % ključnega reaktanta.

$$\omega \cdot \nu_1 = F_{21} - F_{11}$$

$$\omega = \frac{F_{21} - F_{11}}{\nu_1} = \frac{50 - 100}{-2} = 25\ \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Iz enačbe 2 izračunamo množinski tok kisika, $F_{22}$:

$$F_{22} = F_{12} + \omega \cdot \nu_2$$

$$\boldsymbol{F_{22}} = 100 + 25 \cdot (-1) = \mathbf{75}\ \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Iz enačbe 3 izračunamo množinski tok etenoksida, $F_{23}$:

$$F_{23} = \omega \cdot \nu_3$$

$$\boldsymbol{F_{23}} = 25 \cdot 2 = \mathbf{50}\ \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Celotni tok 2 je:

$$\boldsymbol{F_2} = F_{21} + F_{22} + F_{23} = 50 + 75 + 50 = \mathbf{175}\ \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Sedaj lahko izračunamo sestavo na iztoku:

$$x_{21} = \frac{F_{21}}{F_2} = \frac{50}{175} = \mathbf{0{,}286}$$

$$x_{22} = \frac{F_{22}}{F_2} = \frac{75}{175} = \mathbf{0{,}428}$$

$$x_{23} = \frac{F_{23}}{F_2} = \frac{50}{175} = \mathbf{0{,}286}$$

e) **Izračun stopnje presnove** kisika in etena.

Ker se je presnovala drugačna množina reaktanta na uro, kot v primerih c in d, moramo izračunati novo hitrost presnove. Iz enačbe 2 (pod točko c) izračunamo $\omega$:

$$F_{12} - F_{22} + \omega \cdot \nu_2 = 0$$

$$\omega = \frac{F_{22} - F_{21}}{\nu_2} = \frac{60 - 100}{-1} = 40\ \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Iz enačbe 1 izračunamo množinski tok etena, $F_{21}$:

$$\boldsymbol{F_{21}} = F_{11} + \omega \cdot \nu_1 = 100 + 40 \cdot (-2) = \mathbf{20}\ \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Izračun stopnje presnove etena in kisika:

$$\boldsymbol{X}_{C_2H_4} = \frac{F_{11} - F_{21}}{F_{11}} = \frac{100 - 20}{100} = \mathbf{0{,}8} \quad \mathbf{ali} \quad \mathbf{80\%}$$

$$\boldsymbol{X}_{O_2} = \frac{F_{12} - F_{22}}{F_{12}} = \frac{100 - 60}{100} = \mathbf{0{,}4} \quad \mathbf{ali} \quad \mathbf{40\%}$$

<u>Rezultat:</u>

Dokazali smo trditev: če množini reaktantov na vtoku nista v stehiometrijskem razmerju, presnovi nista enaki.

**2. Naloga:**

Rešite prvo nalogo na poenostavljen način!

------------------------------------------------------------------------------------------------------------

**<u>Rešitev:</u>**

a) Enako kot pri prvi nalogi.

b) Enako kot pri prvi nalogi.

c) Če je $X_{C_2H_4}$ = 100 %, potem se porabi ves eten tj. 100 $\frac{\text{kmol}}{\text{h}}$, po reakciji nastane tudi toliko etenoksida ($F_{23}$ = 100$\frac{\text{kmol}}{\text{h}}$), porabi se 50 $\frac{\text{kmol}}{\text{h}}$ kisika. Ostalo je 50 $\frac{\text{kmol}}{\text{h}}$ nezreagiranega kisika ($F_{23}$), ki ga najdemo v iztoku reaktorja.

d) Če je $X_{C_2H_4}$ = 50 %, potem zreagira samo $F_{11}$· 0,5 = 50 $\frac{\text{kmol}}{\text{h}}$ etena in dvakrat manj kisika torej 25 $\frac{\text{kmol}}{\text{h}}$. V **iztoku** iz reaktorja torej najdemo:

$F_{21}$ = 50 $\frac{\text{kmol}}{\text{h}}$ etena,

$F_{22}$ = 75 $\frac{\text{kmol}}{\text{h}}$ kisika in

$F_{23}$ = 50 $\frac{\text{kmol}}{\text{h}}$ etenoksida.

Celotni tok 2 in sestavo izračunamo kot pri prvi nalogi.

e) Če v iztoku najdemo $F_{22} = 60 \ \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$ kisika pomeni, da ga je zreagiralo $40 \ \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$ in če gledamo razmerja v reakciji, dvakrat več etena torej $80 \ \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$ in prav toliko je nastalo etenoksida. V **iztoku** torej najdemo:

$F_{21} = 20 \ \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$ etena,
$F_{22} = 60 \ \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$ kisika in
$F_{23} = 80 \ \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$ etenoksida.

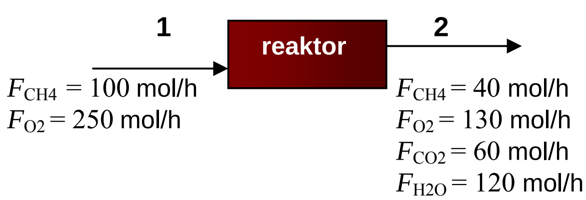
Nato izračunamo presnovo na enak način kot pri prvi nalogi.

**3. Naloga[1]:**

Metan zgoreva do $CO_2$ in $H_2O$ v reaktorju. Reakcija je naslednja:

$$CH_4 + 2\,O_2 \rightarrow CO_2 + 2\,H_2O$$

Podatke vtoka in iztoka prikazuje slika:




a) Koliko metana je zreagiralo?
b) Kateri reaktant je ključni reaktant?
c) Kakšna je stopnja presnove $CH_4$ in kakšna $O_2$?

Nalogo rešite na poenostavljen način!

---

**Rešitev:**

a) Zreagiralo je 60 mol/h $CH_4$.

b) Ključni reaktant:

Razmerje $CH_4 : O_2$, glede na urejeno reakcijo, je: 1 : 2 .
Razmerje na vtoku reaktorja je: 100 : 250 (oz. 1 : 2,5).
Iz rezultata je razvidno, da je **ključni reaktant $CH_4$**, kisik je v prebitku.

c) Stopnja presnove $CH_4$:

$$X_{CH_4} = \frac{100-40}{100} = 0{,}6 \cdot 100\ \% = 60\ \%$$

Stopnja presnove kisika:

$$X_{O_2} = \frac{250-130}{250} = 0{,}48 \cdot 100\ \% = 48\ \%$$

**4. Naloga[1]:**

$SO_3$ pridobivajo z oksidacijo $SO_2$ po naslednji reakciji:

$$2\ SO_2 + O_2 \rightarrow 2\ SO_3$$

Vsako uro proizvedemo 1600 kg $SO_3$. Kakšna množinska tokova (kmol/h) $SO_2$ in $O_2$ potrebujemo za omenjeno proizvodnjo, če je reakcija ireverzibilna in reaktanta v celoti zreagirata v produkt tj. čisti $SO_3$? Pri izračunu masne bilance uporabite poenostavljen način.

---

**Rešitev:**

Najprej masni pretok $SO_3$ spremenimo v množinski tok:

$$F_{SO_3} = \frac{1600\ \text{kg} \cdot \text{h}^{-1}}{80\ \text{kg} \cdot \text{kmol}^{-1}} = 20\,\frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

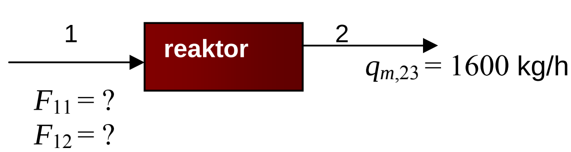
Ker reaktanta v celoti zreagirata v produkt to pomeni, da vtekata v reaktor v stehiometrijskem razmerju. Iz reakcije vidimo, da potrebujemo enako množino $SO_2$ kot nastane $SO_3$, torej 20 kmol/h in le 10 kmol/h $O_2$.

**5. Naloga[1]:**

Rešite prejšnjo nalogo tako, da boste za izračun masne bilance uporabili model, ki temelji na kemijskih komponentah!

---

**Rešitev:**




Oznaka komponent:
$SO_2$ – 1
$O_2$ – 2
$SO_3$ – 3

Kot v prejšnjem primeru tudi tokrat najprej masni tok $SO_3$ preračunamo v množinski tok:

$$F_{23} = \frac{1600\ \mathrm{kg \cdot h^{-1}}}{80\ \mathrm{kg \cdot kmol^{-1}}} = 20 \frac{\mathrm{kmol}}{\mathrm{h}}$$

Sedaj zapišemo enačbe masne bilance za komponente:

komponenta 1: $F_{11} - F_{21} + \omega \cdot \nu_1 = 0$ (1)

komponenta 2: $F_{12} - F_{22} + \omega \cdot \nu_2 = 0$ (2)

komponenta 3: $F_{13} - F_{23} + \omega \cdot \nu_3 = 0$ (3)

Ker na vtoku ni prisoten $SO_3$, je $F_{13} = 0$. Iz enačbe 3 izračunamo hitrost presnove, $\omega$:

$$- F_{23} + \omega \cdot \nu_3 = 0$$
$$-20 + \omega (2) = 0$$
$$2\ \omega = 20$$
$$\omega = 10\ \frac{\mathrm{kmol}}{\mathrm{h}}$$

Ker predpostavimo, da reaktanta v celoti zreagirata je $F_{21} = 0$ in $F_{22} = 0$. Iz enačbe 1 izračunamo vtok $SO_2$:

$$F_{11} - F_{21} + \omega \cdot \nu_1 = 0$$

$$F_{11} + 10 \cdot (-2) = 0$$
$$\boldsymbol{F_{11} = 20\ \frac{\mathrm{kmol}}{\mathrm{h}}}$$

Iz enačbe 2 izračunamo vtok kisika:

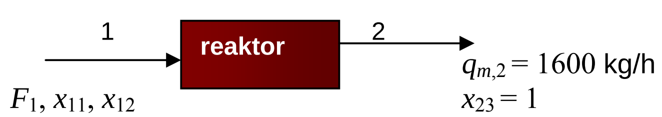
$$F_{12} - F_{22} + \omega \cdot \nu_2 = 0$$
$$F_{12} + 10 \cdot (-1) = 0$$
$$\boldsymbol{F_{12} = 10\ \frac{\mathrm{kmol}}{\mathrm{h}}}$$

**6. Naloga[1]:**

Primer iz naloge 4 rešite tako, da postavite enačbe masne bilance na osnovi kemijskih elementov!

-----------------------------------------------------------------------------------------------------------

**Rešitev:**



S sliko smo ponazorili prisotnost komponent na vtoku in iztoku.

Oznaka komponent:
$SO_2$ – 1
$O_2$ – 2
$SO_3$ – 3

Tako kot v prejšnjih dveh primerih najprej masni pretok $SO_3$ preračunamo v množinski tok: $F_2 = F_{23} = 20$ kmol/h.

Sedaj postavimo enačbe masne bilance na osnovi prisotnih kemijskih elementov.

1. Enačbe in omejitve:

a) Masna bilanca:

element S: $F_1\, x_{11} = F_2\, x_{23}$ (1)
element O: $2\, F_1\, x_{11} + 2\, F_1\, x_{12} = 3\, F_2\, x_{23}$ (2)

b) Omejitve za množinske deleže:

tok 1: $x_{11} + x_{12} = 1$ (3)

c) Omejitve za modelne parametre: jih ni!

2. Število spremenljivk: $N_\mathrm{s} = 5$ ($F_1$, $F_2$, $x_{11}$, $x_{12}$, $x_{23}$)

3. Število načrtovalnih spremenljivk: $N_\mathrm{n} = N_\mathrm{s} - N_\mathrm{e} = 5 - 3 = 2$ (to so: $F_2$, $x_{23}$)

4. Reševanje enačb:

Ker velja: $F_{ij} = F_i\, x_{ij}$ lahko enačbi 1 in 2 poenostavimo:

$F_{11} = F_{23}$ (1a)
$2\, F_{11} + 2\, F_{12} = 3\, F_{23}$ (2a)

Iz enačbe 1a izračunamo $F_{11}$:

$F_{11} = F_{23}$
$\boldsymbol{F_{11} = 20}$ **kmol/h**

Iz enačbe 2a izračunamo $F_{12}$:

$2\, F_{12} = 3\, F_{23} - 2\, F_{11}$
$\boldsymbol{F_{12} = 10}$ **kmol/h**

**7. Naloga[1]:**

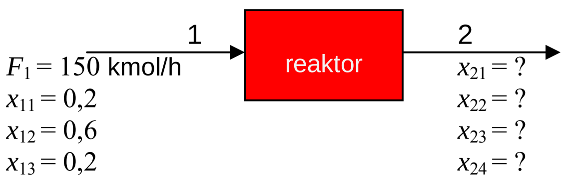
Metan zgoreva, pri čemer nastaneta produkta $CO_2$ in $H_2O$, po naslednji reakciji:

$$CH_4 + 2\,O_2 \rightarrow CO_2 + 2\,H_2O$$

V reaktor vteka 150 kmol/h zmesi s sestavo: $x(CH_4) = 20$ %, $x(O_2) = 60$ % in $x(CO_2) = 20$ %. Stopnja presnove ključnega reaktanta je 90 %. Izračunajte sestavo iztoka! Nalogo rešite na poenostavljen način.

------------------------------------------------------------------------------------------------------------

**Rešitev:**




Oznaka komponent:
$CH_4$ – 1
$O_2$ – 2
$CO_2$ – 3
$H_2O$ – 4

Ključni reaktant je $CH_4$. Razmerje množine snovi po reakciji je: $CH_4 : O_2 = 1 : 2$, dejansko razmerje je 1 : 3.

Ker je stopnja presnove $X_{CH_4} = 0{,}9$ ga zreagira:

$$30\ \frac{\text{kmol}}{\text{h}} \cdot 0{,}9 = 27\ \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

in ostane nezreagiranega:

$$30\ \frac{\text{kmol}}{\text{h}} \cdot 0{,}1 = 3\ \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

**Poraba kisika:**

Po reakciji zreagira 2 krat več kisika kot metana tj. $54\ \frac{\text{kmol}}{\text{h}}\ O_2$.

Ker je na vtoku $90\ \frac{\text{kmol}}{\text{h}}\ O_2$, ostane nezreagiranega $(90 - 54) = 36\ \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$.

**Proizvodnja produkta:**

$27\ \frac{\text{kmol}}{\text{h}}\ CO_2$ in $54\ \frac{\text{kmol}}{\text{h}}\ H_2O$.

**Sestava iztoka:**

$$F_{21} = 3\ \frac{\text{kmol}}{\text{h}}\ CH_4$$

$$F_{22} = 36\ \frac{\text{kmol}}{\text{h}}\ O_2$$

$$F_{23} = 27 + 30 = 57\ \frac{\text{kmol}}{\text{h}}\ CO_2$$

$$F_{24} = 54\ \frac{\text{kmol}}{\text{h}}\ H_2O$$

$$F_2 = F_{21} + F_{22} + F_{23} + F_{24} = 150\ \frac{\text{kmol}}{\text{h}}$$

Množinski deleži komponent:

$$x_{21} = \frac{3}{150} = \mathbf{0{,}02}$$

$$x_{22} = \frac{36}{150} = \mathbf{0{,}24}$$

$$x_{23} = \frac{57}{150} = \mathbf{0{,}38}$$

$$x_{24} = \frac{54}{150} = \mathbf{0{,}36}$$

## LITERATURA

1. R. H. Felder, R. W. Rousseau, Elementary Principles of Chemical Processes, John Wiley & Sons, New York, 1978.

# 5. Obdelava podatkov

## 5.1 Transformacija koordinat in linearna regresija

**1. Naloga:**

Podatki, prikazani v tabeli, so bili dobljeni pri izvajanju poizkusa v laboratoriju. Podajajo odvisnost viskoznosti od temperature in veljajo za dietileter. Transformirajte koordinate (lg $\eta$ proti $1/T$, če je temperatura v K), narišite novo funkcijo, da preverite sipanje točk od premice, in uporabite metodo najmanjših kvadratov za določitev enačbe oz. koeficientov A in B v enačbi za viskoznost. Splošna enačba in podatki so naslednji:

$$\lg \eta = \frac{\mathrm{A}}{T/\mathrm{K}} + \mathrm{B}$$

**Podatki:**

| $t$ / °C | $\eta$ / cP |
|---|---|
| – 80 | 0,958 |
| – 60 | 0,637 |
| – 40 | 0,461 |
| – 20 | 0,362 |
| 0 | 0,284 |
| 20 | 0,233 |
| 40 | 0,197 |
| 60 | 0,166 |
| 80 | 0,140 |

---

**Rešitev:**

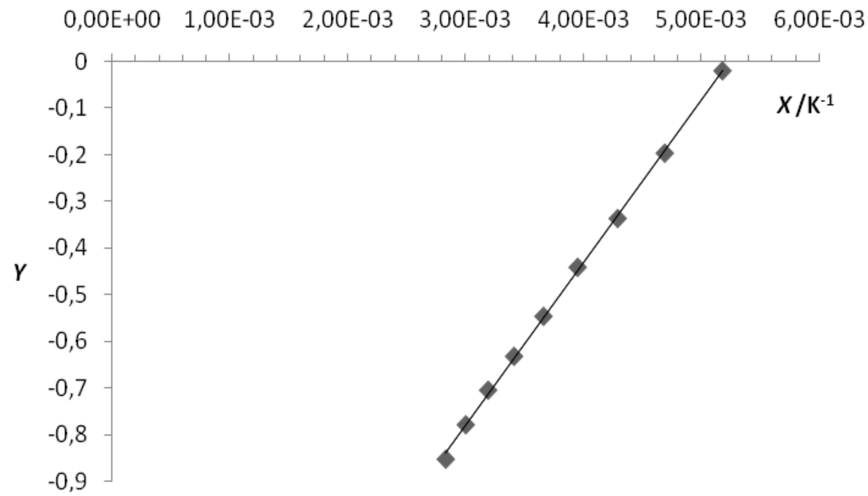
$$X = \frac{1}{T} \qquad Y = \lg \eta$$

Velja enačba premice: $Y = \mathrm{A} \cdot X + \mathrm{B}$

Nove, transformirane koordinate so:

| $X = \frac{1}{T}$ / K$^{-1}$ | $Y$ |
|---|---|
| $5{,}18 \times 10^{-3}$ | – 0,0186 |
| $4{,}69 \times 10^{-3}$ | – 0,1958 |
| $4{,}29 \times 10^{-3}$ | – 0,3363 |
| $3{,}95 \times 10^{-3}$ | – 0,4413 |
| $3{,}66 \times 10^{-3}$ | – 0,5467 |
| $3{,}41 \times 10^{-3}$ | – 0,6326 |
| $3{,}19 \times 10^{-3}$ | – 0,7055 |
| $3{,}00 \times 10^{-3}$ | – 0,7799 |
| $2{,}83 \times 10^{-3}$ | – 0,8539 |

Narišemo graf $Y = f(X)$ in preverimo, če dobimo premico!




Pripravimo podatke za metodo najmanjših kvadratov:

| $X = \frac{1}{T}$ / K$^{-1}$ | $Y$= lg $\eta$ | $X^2$ / K$^{-2}$ | $Y \cdot X$ / K$^{-1}$ |
|---|---|---|---|
| $5{,}18 \times 10^{-3}$ | $-0{,}0186$ | $2{,}68 \times 10^{-5}$ | $-9{,}63 \times 10^{-5}$ |
| $4{,}69 \times 10^{-3}$ | $-0{,}1958$ | $2{,}20 \times 10^{-5}$ | $-9{,}18 \times 10^{-4}$ |
| $4{,}29 \times 10^{-3}$ | $-0{,}3363$ | $1{,}84 \times 10^{-5}$ | $-1{,}44 \times 10^{-3}$ |
| $3{,}95 \times 10^{-3}$ | $-0{,}4413$ | $1{,}56 \times 10^{-5}$ | $-1{,}74 \times 10^{-3}$ |
| $3{,}66 \times 10^{-3}$ | $-0{,}5467$ | $1{,}34 \times 10^{-5}$ | $-2{,}00 \times 10^{-3}$ |
| $3{,}41 \times 10^{-3}$ | $-0{,}6326$ | $1{,}16 \times 10^{-5}$ | $-2{,}16 \times 10^{-3}$ |
| $3{,}19 \times 10^{-3}$ | $-0{,}7055$ | $1{,}02 \times 10^{-5}$ | $-2{,}25 \times 10^{-3}$ |
| $3{,}00 \times 10^{-3}$ | $-0{,}7799$ | $9{,}00 \times 10^{-6}$ | $-2{,}34 \times 10^{-3}$ |
| $2{,}83 \times 10^{-3}$ | $-0{,}8539$ | $8{,}00 \times 10^{-6}$ | $-2{,}42 \times 10^{-3}$ |
| $\sum X$=$3{,}42 \times 10^{-2}$ / K$^{-1}$ | $\sum -4{,}5106$ | $\sum 1{,}35 \times 10^{-4}$ / K$^{-2}$ | $\sum -1{,}536 \times 10^{-2}$ / K$^{-1}$ |

m = 9

$Y = p_1(X) = a_0 + a_1 \cdot X$

$$a_1 = \frac{m\left[\sum X_i \cdot Y_i\right] - \left[\sum X_i\right]\left[\sum Y_i\right]}{m\left[\sum X_i^{\,2}\right] - \left[\sum X_i\right]^2} = \frac{9 \cdot \left[-1{,}536 \times 10^{-2}\right]\mathrm{K}^{-1} - \left[3{,}42 \times 10^{-2}\right]\mathrm{K}^{-1}\left[-4{,}5106\right]}{9 \cdot \left[1{,}35 \times 10^{-4}\right]\mathrm{K}^{-2} - \left[3{,}42 \times 10^{-2}\right]^2\mathrm{K}^{-2}} =$$

$$a_1 = \frac{-0{,}13824 + 0{,}15426}{0{,}001215 - 0{,}0011696} = \frac{0{,}01602}{4{,}54.10^{-5}} = 352{,}86\ \mathrm{K}$$

$$a_0 = \frac{\sum Y_i - a_1 \cdot \sum X_i}{m} = \frac{\left[-4{,}5106\right] - 352{,}86\ \mathrm{K} \cdot \left[3{,}42 \times 10^{-2}\right]\mathrm{K}^{-1}}{9} =$$

$$a_0 = \frac{-4{,}5106 - 12{,}067812}{9} = -1{,}84205$$

<u>Končni zapis enačbe:</u>

Ker je:

$a_1 = A$ $\qquad a_0 = B$ $\qquad$ velja:

$$\mathbf{lg}\ \boldsymbol{\eta} = \mathbf{A}\frac{\mathbf{1}}{\boldsymbol{T}} + \mathbf{B}$$

$$\mathbf{lg}\ \boldsymbol{\eta} = \mathbf{352{,}86}\frac{\mathbf{1}}{\boldsymbol{T}/\mathbf{K}} - \mathbf{1{,}84205}$$

<u>Preizkus:</u>

Za $T = 273{,}15$ K $\Rightarrow$ $\lg \eta = 352{,}86 \cdot 3{,}661 \times 10^{-3} - 1{,}84205 = -0{,}55023$
$\eta = 0{,}282$ cP

in za $T = 333{,}15$ K $\Rightarrow$ $\lg \eta = 352{,}86 \cdot 3 \times 10^{-3} - 1{,}84205 = -0{,}78347$
$\eta = 0{,}165$ cP

## 2. Naloga:

Reakcija A→ B je izvedena v laboratorijskem reaktorju. Zasledovali smo spremembo koncentracije A od časa in zabeležili naslednje meritve:

| $t$ / min | $c_A$ / (mol/L) |
|---|---|
| 0,5 | 1,05 |
| 1 | 0,69 |
| 1,5 | 0,51 |
| 2 | 0,41 |
| 3 | 0,29 |
| 5 | 0,18 |
| 10 | 0,096 |

Transformirajte koordinate v $\frac{1}{c_A} = f(t)$, narišite novo funkcijo, da preverite, če dobite premico in uporabite metodo najmanjših kvadratov za določitev koeficientov enačbe:

$$\frac{1}{c_A} = \frac{1}{c_{A0}} + k \cdot t$$

Iz končnega rezultata določite $c_{A0}$ in $k$ !

---

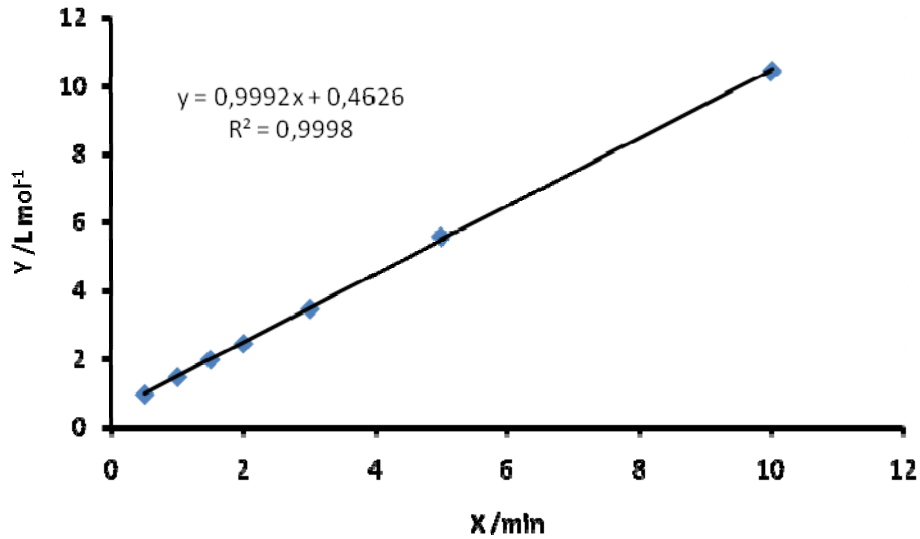
**Rešitev:**

$X = t$ $\qquad$ $Y = \frac{1}{c_A}$

V preglednici prikažemo nove koordinate:

| $X$ / min | $Y$ / (L/mol) |
|---|---|
| 0,5 | 0,9524 |
| 1 | 1,449 |
| 1,5 | 1,96 |
| 2 | 2,439 |
| 3 | 3,448 |
| 5 | 5,5556 |
| 10 | 10,4167 |

Narišemo funkcijo z novimi koordinatami:




Rešitev poiščemo z metodo najmanjših kvadratov.

| $X$ / min | $Y$ / (L/mol) | $X^2$ / min$^2$ | $X{\cdot}Y$ / ((min · L)/mol) |
|---|---|---|---|
| 0,5 | 0,9524 | 0,25 | 0,4762 |
| 1 | 1,449 | 1 | 1,449 |
| 1,5 | 1,96 | 2,25 | 2,94 |
| 2 | 2,439 | 4 | 4,878 |
| 3 | 3,448 | 9 | 10,344 |
| 5 | 5,5556 | 25 | 27,778 |
| 10 | 10,4167 | 100 | 104,167 |
| $\sum X = 23$ | $\sum Y = 26{,}2207$ | $\sum X^2 = 141{,}5$ | $\sum X{\cdot}Y = 152{,}0322$ |

m = 7

Ker je funkcija z novimi koordinatami premica, ki se naj najbolje prilega točkam, v bistvu iščemo koeficiente polinoma 1. stopnje:

$Y = p_1(X) = a_0 + a_1 X$

$$a_1 = \frac{m\left[\sum X_i \cdot Y_i\right] - \left[\sum X_i\right]\left[\sum Y_i\right]}{m\left[\sum X_i^{\,2}\right] - \left[\sum X_i\right]^2} = \frac{7 \cdot 152{,}0322 - 23 \cdot 26{,}2207}{7 \cdot 141{,}5 - 23^2} = \frac{1064{,}2254 - 603{,}0761}{990{,}5 - 529}$$

$$a_1 = 0{,}99924\ \frac{\mathrm{L}}{\mathrm{mol \cdot min}}$$

$$a_0 = \frac{\sum Y_i - a_1 \cdot \sum X_i}{m} = \frac{26{,}2207 - 0{,}99924 \cdot 23}{7} = 0{,}46259\ \frac{\mathrm{L}}{\mathrm{mol}}$$

Za enačbo $\dfrac{1}{c_\mathrm{A}} = \dfrac{1}{c_\mathrm{A0}} - k \cdot t$ velja:

$$a_1 = k \approx 1\ \frac{\mathrm{L}}{\mathrm{mol} \cdot \mathrm{min}}$$

$$a_0 = \frac{1}{c_\mathrm{A0}} \qquad \Rightarrow \qquad c_\mathrm{A0} = \frac{1}{a_0} = \frac{1}{0{,}46259} = 2{,}16\ \frac{\mathrm{mol}}{\mathrm{L}}$$

Končni izraz:

$$\mathbf{\frac{1}{c_A} = 0{,}46259 \left(\frac{L}{mol}\right) + 1 \left(\frac{L}{mol \cdot min}\right) \cdot \mathit{t}}$$

Preizkus:

Pri $t = 1$ min $\Rightarrow \dfrac{1}{c_\mathrm{A}} = 1{,}46259$ in $c_\mathrm{A} = 0{,}684\ \dfrac{\mathrm{mol}}{\mathrm{L}}$

Pri $t = 3$ min $\Rightarrow \dfrac{1}{c_\mathrm{A}} = 3{,}46259$ in $c_\mathrm{A} = 0{,}289\ \dfrac{\mathrm{mol}}{\mathrm{L}}$

Pri $t = 5$ min $\Rightarrow \dfrac{1}{c_\mathrm{A}} = 5{,}46259$ in $c_\mathrm{A} = 0{,}183\ \dfrac{\mathrm{mol}}{\mathrm{L}}$

Rezultat: $c_\mathrm{A0} = 2{,}16$ mol/L, konstanta $k = 1$ L/(mol · min).

Komentar:

Dobljeni rezultati se dobro ujemajo z eksperimentalnimi vrednostmi.

## 3. Naloga:

Transformirajte koordinate tako, da dobite linearno odvisnost parnega tlaka metiletilketona od temperature. Kakšna je približna formula funkcije? Na razpolago so naslednji podatki:

| $t$ / °C | $p^{nas}$ / mmHg |
|---|---|
| – 48,4 | 1 |
| – 28,0 | 5 |
| – 17,7 | 10 |
| – 6,5 | 20 |
| 6,0 | 40 |
| 14,0 | 60 |
| 25,0 | 100 |
| 41,6 | 200 |
| 60,0 | 400 |
| 79,6 | 760 |

------------------------------------------------------------------------------------------------------------

**Rešitev:**

Za zahtevano odvisnost je iz literature poznana naslednja transformacija koordinat:

$$X = \frac{1}{T\ /\mathrm{K}} \qquad Y = \ln p^{nas}$$

Preračunamo nove koordinate:

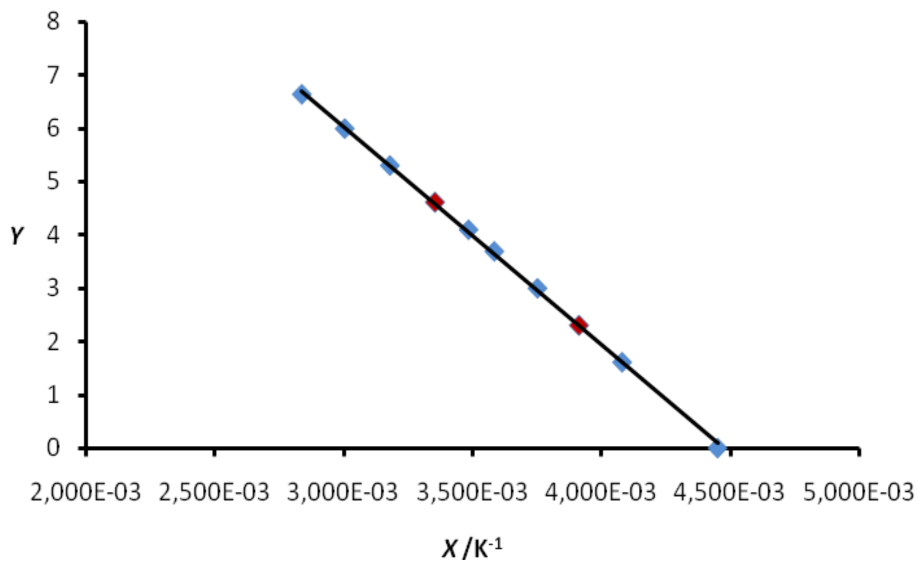
| $T$ / K | $X \cdot 10^3 = 1/T \times 10^3$ / K$^{-1}$ | $Y = \ln p^{nas}$ |
|---|---|---|
| 224,75 | 4,4494 | 0 |
| 245,15 | 4,0791 | 1,6094 |
| 255,45 | 3,9147 | 2,3026 |
| 266,65 | 3,7502 | 2,9957 |
| 279,15 | 3,5823 | 3,6889 |
| 287,15 | 3,4825 | 4,0943 |
| 298,15 | 3,3540 | 4,6052 |
| 314,75 | 3,1771 | 5,2983 |
| 333,15 | 3,0016 | 5,9915 |
| 352,75 | 2,8349 | 6,6333 |

Približno formulo določimo iz grafa, ki predstavlja linearno funkcijo – premico. Torej velja:

$$Y = \mathrm{A} \cdot X + \mathrm{B}$$

kjer je **A** naklon premice in **B** odsek na ordinati.

Narišemo funkcijo $Y = f(X)$:




Izberemo dve točki na premici in izračunamo naklon. V našem primeru ležita dve eksperimentalni točki na premici (rdeče obarvani), zato lahko vzamemo ti dve točki za izračun. V slučaju, da eksperimentalne točke ne ležijo na premici, moramo sami določiti dve točki na premici s pomočjo katerih nato izračunamo naklon.

$$\mathrm{A} = \frac{Y_2 - Y_1}{X_2 - X_1} = \frac{(2{,}3026 - 4{,}6052)\,\mathrm{K}}{(3{,}9147 - 3{,}354)\times 10^{-3}} = \frac{-2{,}3026}{5{,}607\times 10^{-4}} = -4106{,}7\ \mathrm{K}$$

Odsek izračunamo iz izraza:

$$\mathrm{B} = Y - \mathrm{A}\cdot X$$

Za izračun izberemo točko na premici. Naj bo $(X_2, Y_2)$:

$$\mathrm{B} = Y_2 - \mathrm{A}\cdot X_2 = 2{,}3026 - (-4106{,}7)\cdot 3{,}9147\times 10^{-3} = 18{,}3791$$

Zapis približne formule je naslednji:

- če je:

$Y = \mathrm{A}\cdot X + \mathrm{B}$

velja:

$$\mathbf{ln}\ \boldsymbol{p}^{\text{nas}}\ \mathbf{(mmHg) = -\ 4106{,}7} \cdot \frac{\mathbf{1}}{\boldsymbol{T}\,/\,\mathbf{K}}\ \mathbf{+\ 18{,}\ 3791}$$

<u>Preizkus:</u>

Za $t = -28$ °C

$$\ln p^{\text{nas}} = -4106{,}7 \cdot \frac{1}{245{,}15} + 18{,}3791 = 1{,}62732$$
$$p^{\text{nas}} = 5{,}09 \text{ mmHg}$$

in za $t = 60$ °C

$$\ln p^{\text{nas}} = -4106{,}7 \cdot \frac{1}{333{,}15} + 18{,}3791 = 6{,}05222$$
$$p^{\text{nas}} = 425 \text{ mmHg}$$

<u>Komentar:</u>

Ker je to približna formula, lahko pride v določenem območju do odstopanj od resničnih vrednosti, kot npr. v primeru izračuna parnega tlaka pri 60 °C.

**4. Naloga[4]:**

Na voljo imamo naslednje podatke:

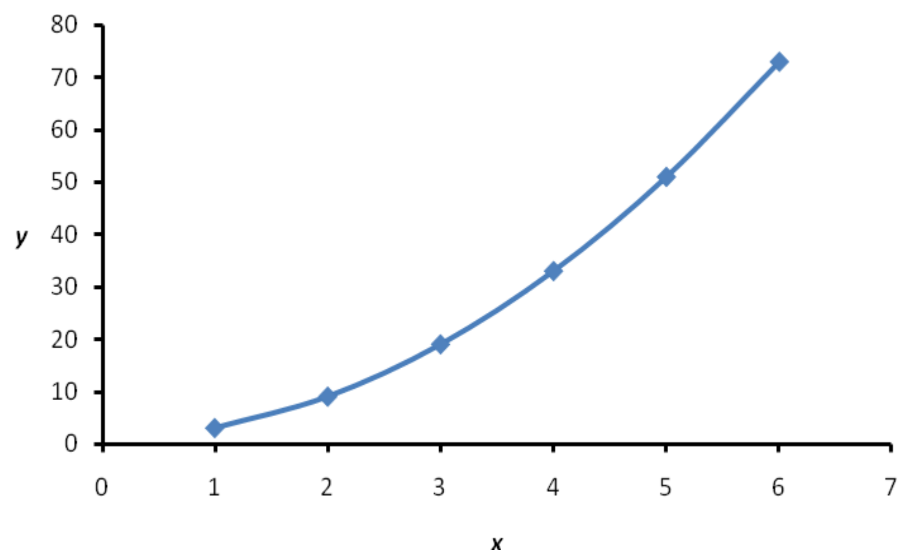
| $x$ | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $y$ | 3 | 9 | 19 | 33 | 51 | 73 |

Splošna enačba funkcije je: $y = \mathrm{a} \cdot x^2 + \mathrm{b}$.
Transformirajte koordinate tako, da dobite premico in iz naklona in odseka določite a in b. Zapišite končno enačbo!

---

**Rešitev:**

Naprej narišemo osnovno funkcijo.



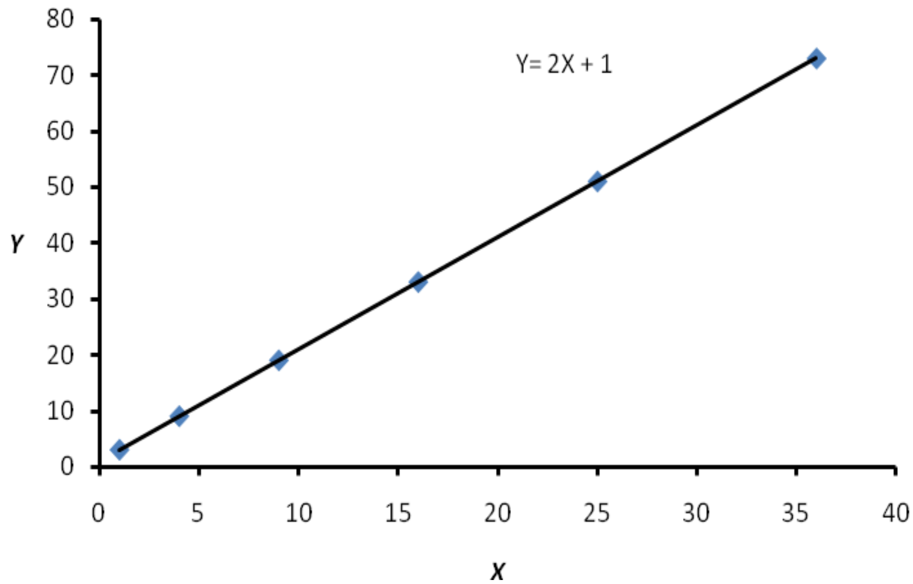

Iz slike kakor tudi iz zapisa enačbe je razvidno, da je funkcija nelinearna. V našem primeru bomo dobili premico, če bodo nove koordinate $Y = y$ in $X = x^2$.

Izračunajmo nove koordinate in narišimo novo funkcijo $Y = f(X)$:

| $X$ | 1 | 4 | 9 | 16 | 25 | 36 |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $Y$ | 3 | 9 | 19 | 33 | 51 | 73 |

Če je nova funkcija premica, potem velja:

$$Y = \mathrm{A} \cdot X + \mathrm{B}$$




Iz slike je razvidno, da vse točke ležijo na premici. Če izberemo dve točki na premici, lahko izračunamo naklon:

$$\mathrm{A} = \frac{Y_2 - Y_1}{X_2 - X_1} = \frac{51-9}{25-4} = \frac{42}{21} = 2$$

Odsek izračunamo iz izraza:

$\mathrm{B} = Y - \mathrm{A} \cdot X$

Izberemo točko ($X_2$, $Y_2$):

$\mathrm{B} = Y_2 - \mathrm{A} \cdot X_2 = 51 - 2 \cdot 25 = 1$

Sedaj zapišimo enačbo premice kot:

$Y = 2\,X + 1$

in če izrazimo $Y = y$ in $X = x^2$, ter a = A in b = B, pridemo do izraza prvotne funkcije, ki je:

$\boldsymbol{y = 2\,x^2 + 1}$

Preizkus:
Pri $x = 3 \;\Rightarrow\; y = 2 \cdot 3^2 + 1 = 19$
in pri $x = 6 \;\Rightarrow\; y = 2 \cdot 6^2 + 1 = 73$

Komentar:
Gornji zapis enačbe je pravilen torej: $\boldsymbol{y = 2\,x^2 + 1}$ .

**5. Naloga**[4]**:**

Odvisnost dveh spremenljivk $P$ in $t$ lahko izrazimo z enačbo:

$$P = \frac{1}{m \cdot t^{0,5} + r}$$

Znani so naslednji podatki:

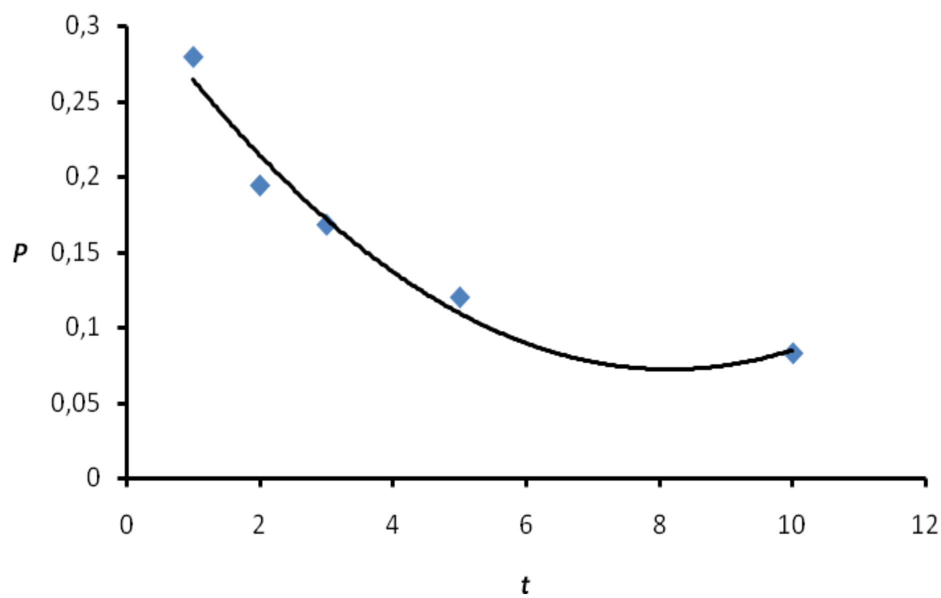
| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| $P$ | 0,279 | 0,194 | 0,168 | 0,120 | 0,083 |
| $t$ | 1,0 | 2,0 | 3,0 | 5,0 | 10,0 |

a) Narišite funkcijo $P = f(t)$.
b) Transformirajte koordinate tako, da dobite linearno funkcijo (premico) in sicer $\frac{1}{P}$ proti $t^{0,5}$. Narišite novo funkcijo!
c) S približno metodo določite $m$ in $r$ in zapišite končno enačbo!

---

**Rešitev:**

a) Graf osnovne funkcije prikazuje naslednja slika:




b) V naslednjem koraku bo prikazano, kako določimo nove koordinate. Osnovni zapis enačbe, ki podaja odvisnost $P$ od $t$ je:

$$P = \frac{1}{m \cdot t^{0,5} + r}$$

Če enačbo pomnožimo z $(m \cdot t^{0,5} + r)$ dobimo izraz:

$$P\left(m \cdot t^{0,5} + r\right) = 1$$

in če delimo gornji izraz s *P*, dobimo:

$$m \cdot t^{0,5} + r = \frac{1}{P}$$

Če dobro pogledamo gornjo enačbo, lahko ugotovimo, da bo nova funkcija linearna samo v primeru, ko bo:

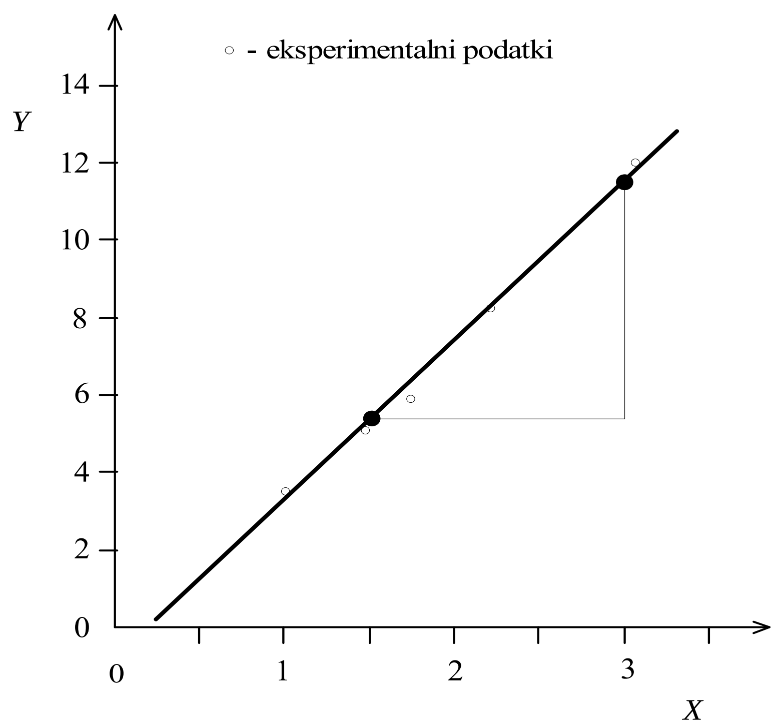
$$X = t^{0,5} \quad \text{in} \quad Y = \frac{1}{P}$$

V tem primeru je *m* naklon premice in *r* odsek na ordinati (ko je $X = 0$).

Preračunane nove koordinate so:

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| *X* | 1,0 | 1,414 | 1,732 | 2,236 | 3,162 |
| *Y* | 3,584 | 5,155 | 5,952 | 8,333 | 12,048 |

Spodnja slika prikazuje novo (linearno) funkcijo.




Torej lahko zapišemo:

$$Y = m \cdot X + r$$

c) Izračun naklona premice, $m$:

$$m = \frac{Y_2 - Y_1}{X_2 - X_1}$$

Izberimo točki na premici: $X_1$=1,5 $Y_1$=5,4 in
$X_2$=3 $Y_2$=11,3

Sledi:

$$m = \frac{11{,}3 - 5{,}4}{3 - 1{,}5} = \frac{5{,}9}{1{,}5} = 3{,}93$$

Sedaj, ko je poznan naklon, $m$, iz enačbe premice izračunamo odsek, $r$, na ordinatni osi:

$$r = Y - m \cdot X$$

Pri ($X_1$, $Y_1$) dobimo:

$$r = 5{,}4 - 3{,}93 \cdot 1{,}5 = -\,0{,}495$$

Zapis enačbe premice je sedaj:

$$Y = 3{,}93 \cdot X - 0{,}495$$

Ker je $Y = \dfrac{1}{P}$ in $X = t^{0,5}$, lahko torej zapišemo:

$$\frac{1}{P} = 3{,}93 \cdot t^{0,5} - 0{,}495$$ oz. inverzno:

$$\boldsymbol{P = \frac{1}{3{,}93 \cdot t^{0,5} - 0{,}495}}$$ Tako smo določili približno enačbo ali formulo funkcije $P = f(t)$.

Preizkus:

pri $t = 3 \Rightarrow P = 0{,}158$

pri $t = 5 \Rightarrow P = 0{,}121$

pri $t = 8 \Rightarrow P = 0{,}094$

pri $t = 10 \Rightarrow P = 0{,}084$

Komentar:
Izpeljana približna formula da kar dobre rezultate!

## 5.2 Numerična interpolacija

**6. Naloga:**

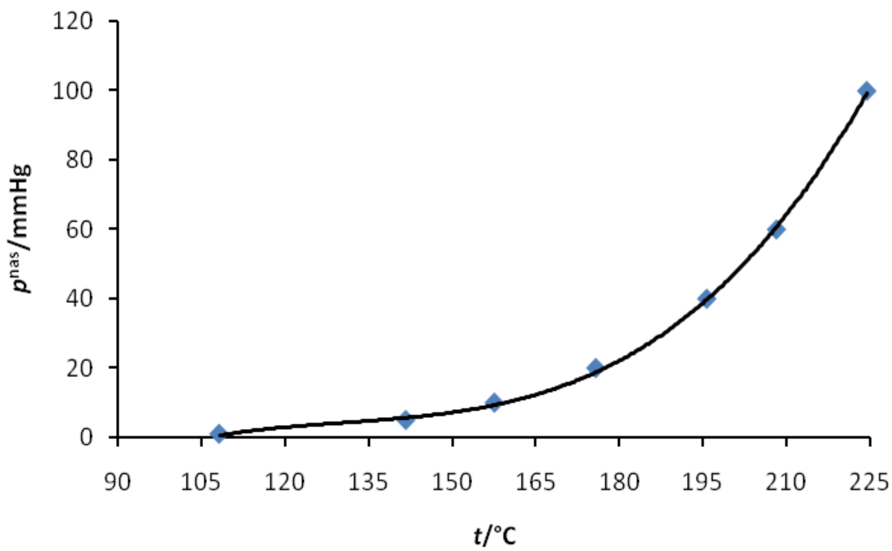
V laboratoriju smo merili odvisnost parnega tlaka benzofenona od temperature in zabeležili naslednje meritve:

| Št. meritve | $t$ / °C | $p^{nas}$ / mmHg |
|---|---|---|
| 1 | 108,2 | 1 |
| 2 | 141,7 | 5 |
| 3 | 157,6 | 10 |
| 4 | 175,8 | 20 |
| 5 | 195,7 | 40 |
| 6 | 208,2 | 60 |
| 7 | 224,4 | 100 |

Narišite funkcijo $p^{nas} = f(t)$. Z linearno interpolacijo določite parni tlak pri $t$ = 200 °C! Komentirajte rezultat.

------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

**Rešitev:**




Iz grafa vidimo, da je funkcija nelinearna.

Splošna formula linearne interpolacije:

$$y \approx p_1(x) = y_i + (x - x_i)\frac{(y_{i+1} - y_i)}{(x_{i+1} - x_i)}$$

Za naš primer iščemo vrednost funkcije med točkama 5 in 6. Torej je:

$x_i = t_i$ $\qquad$ $y_i = p_i^{\text{nas}}$

$i = 5$
$x_5 = 195{,}7$
$x_6 = 208{,}2$
$y_5 = 40$
$y_6 = 60$

$$p^{\text{nas}} = y \approx y_5 + (x - x_5)\frac{(y_6 - y_5)}{(x_6 - x_5)}$$

$$p^{\text{nas}} = y \approx 40 + (200 - 195{,}7)\frac{(60 - 40)}{(208{,}2 - 195{,}7)}$$

$$p^{\text{nas}} = y \approx 40 + (4{,}3)\frac{20}{12{,}5} = 46{,}9 \ \text{mmHg}$$

Komentar:
Zaradi nelinearnosti funkcije bi verjetno dobili boljši rezultat s kvadratno interpolacijo.

**7. Naloga:**

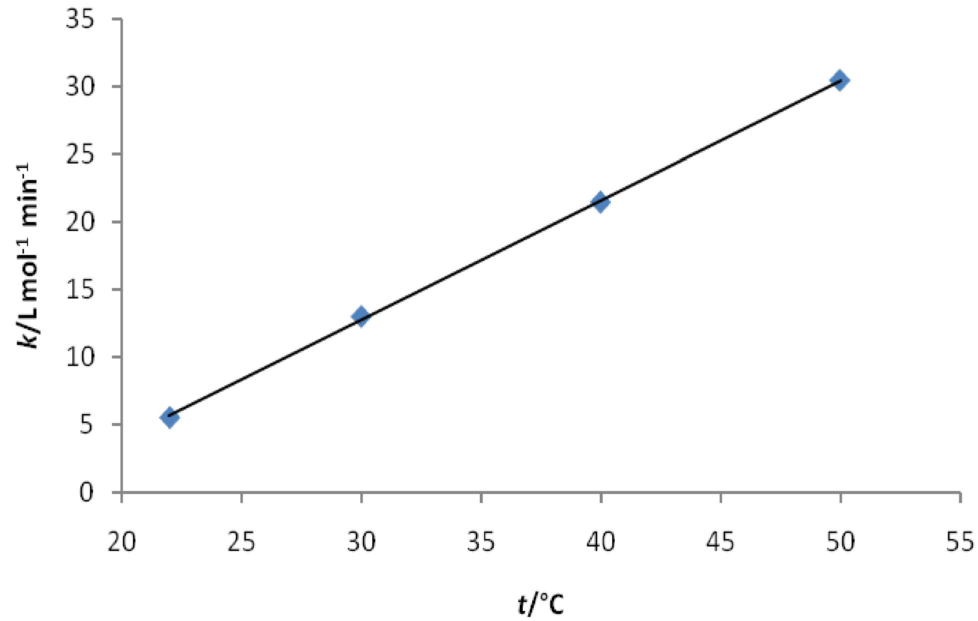
Konstanta reakcijske hitrosti je odvisna od temperature. Pri poteku reakcije A + B → C + D, smo dobili naslednje rezultate:

| Št. meritve | $t$ / °C | $k$ / (L/(mol · min)) |
|---|---|---|
| 1 | 22 | 5,5 |
| 2 | 30 | 13 |
| 3 | 40 | 21,5 |
| 4 | 50 | 30,5 |

Določite konstanto reakcijske hitrosti, $k$, pri temperaturi $t$ = 35 °C z linearno interpolacijo! Narišite funkcijo $k = f(t)$ in komentirajte rezultat.

---

**Rešitev:**




Splošna formula:

$$y \approx p_1(x) = y_i + (x - x_i)\frac{(y_{i+1} - y_i)}{(x_{i+1} - x_i)}$$

Za naš primer iščemo vrednost funkcije med točkama 2 in 3. Torej je:

$x_i = t_i$ $\qquad$ $y_i = k_i$

$i = 2$
$x_2 = 30$
$x_3 = 40$
$y_2 = 13$
$y_3 = 21{,}5$

$$k = y \approx y_2 + (x - x_2)\frac{(y_3 - y_2)}{(x_3 - x_2)} = 13 + (35 - 30)\frac{(21{,}5 - 13)}{(40 - 30)} = 13 + 5\frac{8{,}5}{10} =$$

$$k = y \approx 13 + 4{,}25 = 17{,}25 \ \text{L/(mol} \cdot \text{min)}$$

Komentar:
Ker funkcija kaže približno linearno odvisnost, je rezultat dobljen z linearno interpolacijo zadovoljiv.

**8. Naloga[1]:**

Poznano je, da se gostota vode s temperaturo rahlo spreminja. Določite gostoto vode pri $t$ = 50 °C in pri tem uporabite:

a) linearno interpolacijo in
b) kvadratno interpolacijo.

Dobljen rezultat primerjajte z eksperimentalnim ($\rho_{eksp.}$ = 988,037 g/L) !

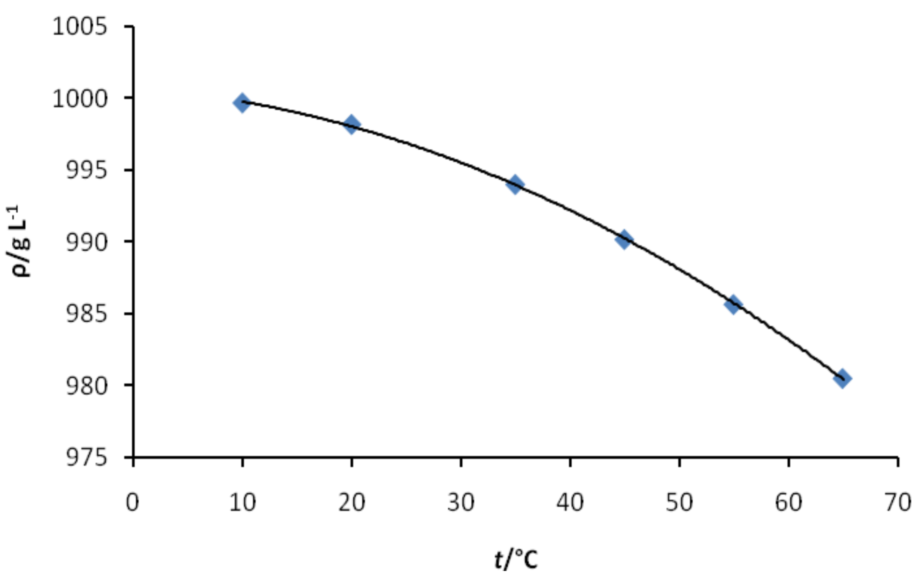
Podatki:

| $i$ | $t$ / °C | $\rho$ / (g/L) |
|---|---|---|
| 1 | 10 | 999,699 |
| 2 | 20 | 998,204 |
| 3 | 35 | 994,032 |
| 4 | 45 | 990,213 |
| 5 | 55 | 985,696 |
| 6 | 65 | 980,557 |

------------------------------------------------------------------------------------------------------------

**Rešitev:**

Narišemo graf, da ugotovimo obnašanje funkcije $\rho = f(t)$:




Funkcija je nelinearna. Določimo vrednost gostote kot zahteva naloga.

a) **Linearna interpolacija**:

Izhajamo iz splošne formule polinoma 1. stopnje:

$$f(x) \approx p_1(x) = \mathrm{a}_0 + \mathrm{a}_1 \cdot x$$

$$y \approx p_1(x) = y_i + (x - x_i)\frac{(y_{i+1} - y_i)}{(x_{i+1} - x_i)}$$

Za določitev $\mathrm{a}_0$ in $\mathrm{a}_1$ potrebujemo dve točki: $(x_i, y_i)$ in $(x_{i+1}, y_{i+1})$. Na osnovi podatkov izpeljemo splošno enačbo (glejte učbenik). Za naš primer iščemo vrednost funkcije med točkama 4 in 5. Torej velja:

$i = 4$
$x_i = t_i \qquad y_i = \rho_i$

in dalje:

$x_4 = 45 \qquad y_4 = 990{,}213$

$x_5 = 55 \qquad y_5 = 985{,}696$

$$\rho = y \approx y_4 + (x - x_4)\frac{(y_5 - y_4)}{(x_5 - x_4)}$$

$$\rho = y \approx 990{,}213 + (50 - 45) \cdot \frac{(985{,}696 - 990{,}213)}{(55 - 45)} = 990{,}213 + 5 \cdot \frac{-4{,}517}{10} = 987{,}954\ \frac{\mathrm{g}}{\mathrm{L}}$$

**b) Kvadratna interpolacija:**

V neposredni bližini točke $(x, y)$ moramo izbrati tri točke. Če je

$i = 4$

potem velja:

$x_4 = 45 \qquad y_4 = 990{,}213$
$x_5 = 55 \qquad y_5 = 985{,}696$
$x_6 = 65 \qquad y_6 = 980{,}557$

Splošna formula:

$$y \approx p_2(x) = \frac{(x - x_{i+1})(x - x_{i+2})}{(x_i - x_{i+1})(x_i - x_{i+2})} \cdot y_i + \frac{(x - x_i)(x - x_{i+2})}{(x_{i+1} - x_i)(x_{i+1} - x_{i+2})} \cdot y_{i+1} + \frac{(x - x_i)(x - x_{i+1})}{(x_{i+2} - x_i)(x_{i+2} - x_{i+1})} \cdot y_{i+2}$$

Ker je $x_i = x_4$, $x_{i+1} = x_5$ in $x_{i+2} = x_6$ ter
$y_i = y_4$, $y_{i+1} = y_5$ in $y_{i+2} = y_6$ velja:

$$\rho = y \approx \frac{(50-55)(50-65)}{(45-55)(45-65)} \cdot 990{,}213 + \frac{(50-45)(50-65)}{(55-45)(55-65)} \cdot 985{,}696 + \frac{(50-45)(50-55)}{(65-45)(65-55)} \cdot 980{,}557 =$$

$$= \frac{-5(-15)}{-10(-20)} \cdot 990{,}213 + \frac{5(-15)}{10(-10)} \cdot 985{,}696 + \frac{5(-5)}{20 \cdot 10} \cdot 980{,}557 =$$

$$= 371{,}329 + 739{,}272 - 122{,}569 =$$

$$= 988{,}032 \ \frac{\mathrm{g}}{\mathrm{L}}$$

<u>Komentar:</u>

Odstopanja od eksperimentalne vrednosti so mala in sicer:
a) za 0,084 g/L pri linerni interpolaciji in
b) za 0,005 g/L pri kvadratni interpolaciji.

Iz tega lahko sklepamo, da je rezultat, dobljen s kvadratno interpolacijo primernejši.

## LITERATURA

1. Perry R. H., Green D., Perry's Chemical Engineer's Handbook, 6th Edition, McGraw-Hill Book Company, New York, 1984, str. 3-75.

# 6. Osnove numeričnih metod

**1. Naloga:**

Podano imamo funkcijo: $x = e^{-x}$ . Najdite možno rešitev z:

a) grafično metodo,
b) metodo zaporedne substitucije in
c) Newtonovo metodo.

Ali dosežete rešitev po treh iteracijah, če je $\varepsilon = 0{,}001$ ?
------------------------------------------------------------------------------------------------------------

**Rešitev:**

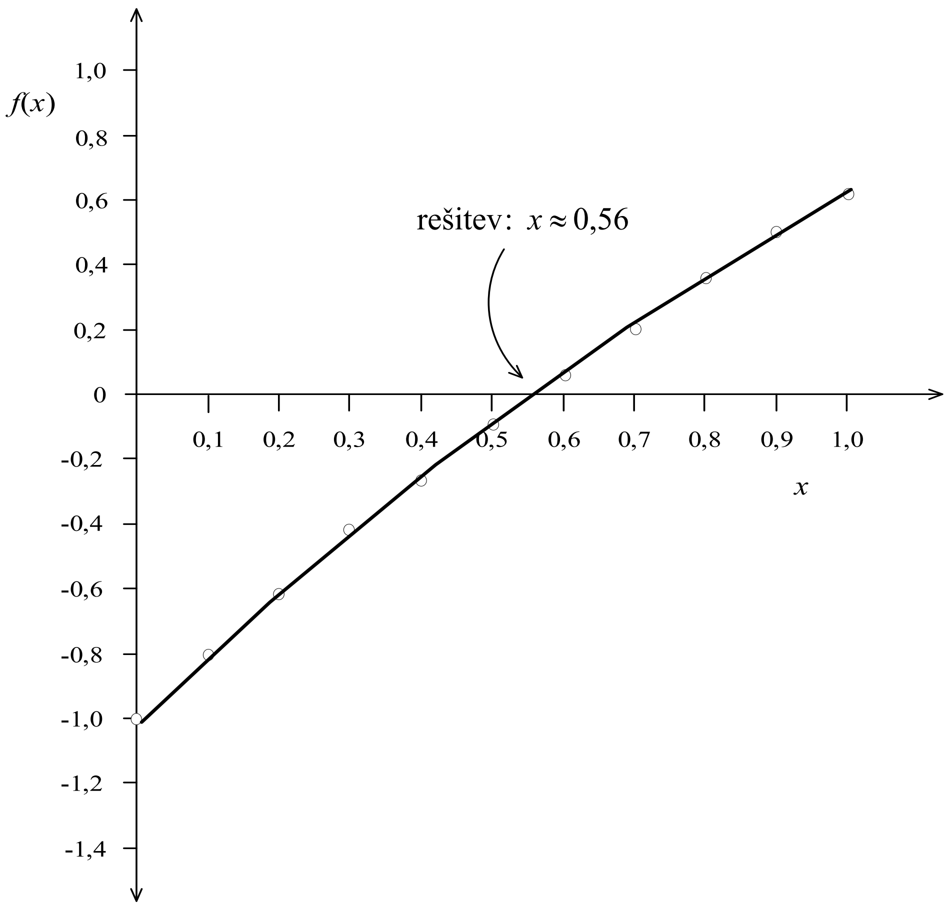
a) Pri reševanju funkcije z **grafično metodo** zapišemo funkcijo v obliki $f(x) = 0$. Torej za naš primer velja:

$$f(x) = x - e^{-x} = 0$$

Predpostavimo nekaj vrednosti za $x$ in izračunajmo $f(x)$:

| $x$ | $f(x)$ |
|---|---|
| 0 | - 1,0 |
| 0,1 | - 0,8 |
| 0,2 | - 0,62 |
| 0,3 | - 0,44 |
| 0,4 | - 0,27 |
| 0,5 | - 0,106 |
| 0,6 | 0,051 |
| 0,7 | 0,203 |
| 0,8 | 0,350 |
| 0,9 | 0,493 |
| 1,0 | 0,632 |

Narišemo graf. Na ordinato nanašamo vrednosti $f(x)$ in na absciso $x$. Tam, kjer funkcija $f(x)$ seka absciso, dobimo rešitev.




Iz slike odčitamo rešitev, ki znaša $x \approx 0{,}56$ .

b) Pri reševanju funkcije z **metodo zaporedne substitucije** izrazimo funkcijo v obliki:

$$x = f(x).$$

Za naš primer velja: $x = e^{-x}$

Ker je približna rešitev, dobljena z grafično metodo, $x = 0{,}5$, lahko to vrednost vzamemo kot začetno, predpostavljeno vrednost. Torej $x^{(1)} = 0{,}5$ in $\varepsilon = 0{,}001$.

Splošne enačbe:

$x^{(k+1)} = f(x^{(k)})$ in $\left| \dfrac{x^{(k+1)} - x^{(k)}}{x^{(k)}} \right| \le \varepsilon$

**1. iteracija:**

$k = 1$

$x^{(2)} = f(x^{(1)}) = e^{-0,5} = \mathbf{0{,}6065}$ $\qquad \left|\dfrac{0{,}6065 - 0{,}5}{0{,}5}\right| = 0{,}213 > \varepsilon$

**2. iteracija:**

$k = 2$

$x^{(3)} = f(x^{(2)}) = e^{-0,6065} = \mathbf{0{,}5452}$ $\qquad \left|\dfrac{0{,}5452 - 0{,}6065}{0{,}6065}\right| = 0{,}10107 > \varepsilon$

**3. iteracija:**

$k = 3$

$x^{(4)} = f(x^{(3)}) = e^{-0,5452} = \mathbf{0{,}5797}$ $\qquad \left|\dfrac{0{,}5797 - 0{,}5452}{0{,}5452}\right| = 0{,}063 > \varepsilon$

Preglednica z rezultati:

| $k$ | $x^{(k)}$ | $f(x^{(k)}) = x^{(k+1)}$ | $\left\|\dfrac{x^{(k+1)} - x^{(k)}}{x^{(k)}}\right\|$ |
|---|---|---|---|
| 1 | 0,5 | 0,6065 | 0,213 |
| 2 | 0,6065 | 0,5452 | 0,10107 |
| 3 | 0,5452 | 0,5797 | 0,063 |

Rezultat: Po treh iteracijah še ni dosežen konvergenčni kriterij in s tem rešitev!

c) Pri reševanju funkcije z **Newtonovo metodo** izrazimo funkcijo na naslednji način:

$$f(x) = 0$$

in za naš primer: $\qquad f(x) = x - e^{-x} = 0$

Splošne enačbe:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})} \qquad k = 1,2,\ldots.. \quad \text{in} \qquad \left|\frac{x^{(k+1)} - x^{(k)}}{x^{(k)}}\right| \le \varepsilon$$

in dalje za naš primer:

$$f(x^{(k)}) = x^{(k)} - \mathrm{e}^{-x^{(k)}} \qquad \text{in} \qquad f'(x^{(k)}) = 1 + \mathrm{e}^{-x^{(k)}}$$

**1. iteracija:**

$k = 1$

$x^{(1)} = 0{,}5$

$$f(x^{(1)}) = 0{,}5 - \mathrm{e}^{-0{,}5} = -0{,}106$$

$$f'(x^{(1)}) = 1 + \mathrm{e}^{-0{,}5} = 1{,}606$$

$$x^{(2)} = x^{(1)} - \frac{f(x^{(1)})}{f'(x^{(1)})} = 0{,}5 - \frac{-0{,}106}{1{,}606} = \mathbf{0{,}566}$$

$$\left|\frac{0{,}566 - 0{,}5}{0{,}5}\right| = 0{,}132 > \varepsilon$$

**2.iteracija:**

$k = 2$

$$f(x^{(2)}) = 0{,}566 - \mathrm{e}^{-0{,}566} = -0{,}00179$$

$$f'(x^{(2)}) = 1 + \mathrm{e}^{-0{,}566} = 1{,}5678$$

$$x^{(3)} = x^{(2)} - \frac{f(x^{(2)})}{f'(x^{(2)})} = 0{,}566 - \frac{-0{,}00179}{1{,}5678} = \mathbf{0{,}567}$$

$$\left|\frac{0{,}567 - 0{,}566}{0{,}566}\right| = 0{,}00177 > \varepsilon$$

**3. iteracija:**

$k = 3$

$$f(x^{(3)}) = 0{,}567 - \mathrm{e}^{-0{,}567} = -0{,}000224$$

$$f'(x^{(3)}) = 1 + \mathrm{e}^{-0{,}567} = 1{,}56722$$

$$x^{(4)} = x^{(3)} - \frac{f(x^{(3)})}{f'(x^{(3)})} = 0{,}567 - \frac{-0{,}000224}{1{,}56722} = \mathbf{0{,}5671}$$

$$\left|\frac{0{,}5671 - 0{,}567}{0{,}567}\right| = 0{,}00017 < \varepsilon$$

Preglednica z rezultati:

| $k$ | $x^{(k)}$ | $x^{(k+1)}$ | $\left\|\frac{x^{(k+1)} - x^{(k)}}{x^{(k)}}\right\|$ |
|---|---|---|---|
| 1 | 0,5 | 0,566 | 0,132 |
| 2 | 0,566 | 0,567 | 0,00177 |
| 3 | 0,567 | 0,5671 | 0,00017 |

Rezultat: Po tretji iteraciji je izpolnjen konvergenčni kriterij in dosežena rešitev.

**2. Naloga[1]:**

Imamo naslednjo funkcijo: $f(x) = x^3 - 3x + 1 = 0$ .

- z grafično metodo ponazorite možne rešitve,
- najdite pravilno obliko enačbe, ki bi dala rešitev z metodo zaporedne substitucije, in za katero bo torej veljalo: $|f'(x)| < 1$ pri $x = 1{,}5$ in
- s pravilno obliko izvedite pet iteracij. Začetna vrednost $x^{(1)} = 1{,}5$. Ugotovite, ali ste dosegli konvergenčni kriterij, če je $\varepsilon = 0{,}001$ !

-----------------------------------------------------------------------------------------------------

**Rešitev:**

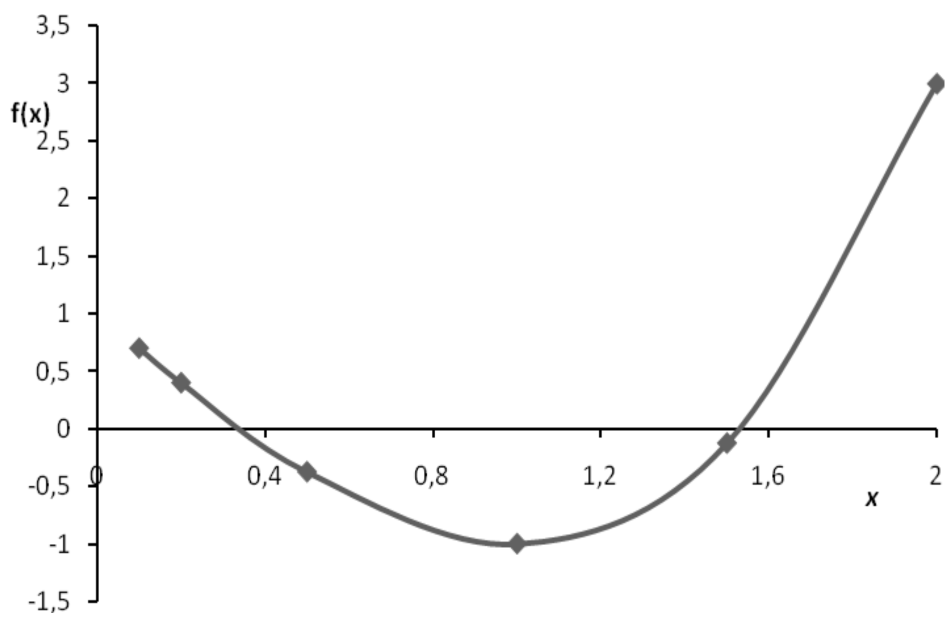
a) Pri iskanju rešitve z **grafično metodo** zapišemo funkcijo v obliki $f(x) = 0$. Torej za naš primer velja:

$$f(x) = x^3 - 3\,x + 1 = 0$$

Predpostavimo nekaj vrednosti za $x$ in izračunajmo $f(x)$:

| $x$ | $f(x)$ |
|---|---|
| 0,1 | 0,701 |
| 0,2 | 0,4 |
| 0,5 | - 0,375 |
| 1 | - 1 |
| 1,5 | - 0,125 |
| 2 | 3 |

Narišemo graf. Na ordinato nanašamo vrednosti $f(x)$ in na absciso $x$. Tam, kjer funkcija seka absciso, dobimo rešitve.




Rezultat:

Iz slike je razvidno, da ima v danem območju funkcija dve rešitvi:

- $x_1 \approx 0{,}35$ in
- $x_2 \approx 1{,}5$.

b) Pri reševanju funkcije z **metodo zaporedne substitucije** izrazimo funkcijo v obliki:

$$x = f(x)$$

Predpostavimo, da izrazimo $x$ na naslednji način:

$$3x = x^3 + 1 \qquad / :3$$

$$\boldsymbol{x} = \frac{x^3+1}{3} = \frac{x^3}{3} + \frac{1}{3} = \boldsymbol{\frac{1}{3}x^3 + \frac{1}{3}}$$

Ali je $|f'(x)|$ pri $x$ = 1,5 manjši od ena? Preverimo. Analitično izrazimo $f'(x)$:

$$f'(x) = 3 \cdot \frac{1}{3}x^2 = x^2$$

in dalje:

$$|f'(1{,}5)| = |1{,}5^2| = \mathbf{2{,}25 > 1}$$

Z dano obliko $f(x)$ ne bomo našli rešitve. Zaporedje bo divergiralo.

Izrazimo ***x*** **na drugi** način:

$$x^3 = 3x - 1$$

$$x \cdot x^2 = 3x - 1 \ / : x^2$$

$$\boldsymbol{x} = \frac{3x-1}{x^2} = \frac{3x}{x^2} - \frac{1}{x^2} = \frac{3}{x} - \frac{1}{x^2} = \boldsymbol{3\,x^{-1} - x^{-2}}$$

Analitično izražen in izračunan odvod pri $x$ = 1,5 je:

$$f'(x) = -\,3\,x^{-2} + 2\,x^{-3}$$

$$f'(x) = -\frac{3}{x^2} + \frac{2}{x^3}$$

$$|\boldsymbol{f'(1{,}5)}| = |-1{,}33 + 0{,}593| = |-0{,}737| = \mathbf{0{,}737 < 1}$$

Z izpeljano obliko $f(x)$ bomo dosegli rešitev!

c) Izvedimo **pet iteracij**, če je $x^{(1)} = 1{,}5$ in $\varepsilon = 0{,}001$:

Za naš primer velja:

$$x = f(x) \qquad \text{oz.} \qquad x = \frac{3}{x} - \frac{1}{x^2}$$

in dalje:

$$x^{(k+1)} = f(x^{(k)}) \qquad \text{oz.} \qquad x^{(k+1)} = \frac{3}{x^{(k)}} - \frac{1}{x^{(k)2}}$$

**1. <u>iteracija:</u>**

$k = 1$

$$x^{(2)} = \frac{3}{1{,}5} - \frac{1}{1{,}5^2} = 2 - 0{,}44 = 1{,}56 \qquad \left|\frac{1{,}56 - 1{,}5}{1{,}5}\right| = 0{,}04 > \varepsilon$$

**2. <u>iteracija:</u>**

$k = 2$

$$x^{(3)} = \frac{3}{1{,}56} - \frac{1}{1{,}56^2} = 1{,}923 - 0{,}41 = 1{,}513 \qquad \left|\frac{1{,}513 - 1{,}56}{1{,}56}\right| = 0{,}03 > \varepsilon$$

**3. <u>iteracija:</u>**

$k = 3$

$$x^{(4)} = \frac{3}{1{,}513} - \frac{1}{1{,}513^2} = 1{,}983 - 0{,}437 = 1{,}546 \qquad \left|\frac{1{,}546 - 1{,}513}{1{,}513}\right| = 0{,}02 > \varepsilon$$

**4. <u>iteracija:</u>**

$k = 4$

$$x^{(5)} = \frac{3}{1{,}546} - \frac{1}{1{,}546^2} = 1{,}94 - 0{,}418 = 1{,}522 \qquad \left|\frac{1{,}522 - 1{,}546}{1{,}546}\right| = 0{,}015 > \varepsilon$$

**5. <u>iteracija:</u>**

$k = 5$

$$x^{(6)} = \frac{3}{1{,}522} - \frac{1}{1{,}522^2} = 1{,}971 - 0{,}432 = 1{,}539 \qquad \left|\frac{1{,}539 - 1{,}522}{1{,}522}\right| = 0{,}011 > \varepsilon$$

Preglednica z rezultati:

| $k$ | $x^{(k)}$ | $f(x^{(k)}) = x^{(k+1)}$ | $\left\lvert \frac{x^{(k+1)} - x^{(k)}}{x^{(k)}} \right\rvert$ |
|---|---|---|---|
| 1 | 1,5 | 1,56 | 0,04 |
| 2 | 1,56 | 1,513 | 0,03 |
| 3 | 1,513 | 1,546 | 0,02 |
| 4 | 1,546 | 1,522 | 0,015 |
| 5 | 1,522 | 1,539 | 0,011 |

Rezultat:
Ker po petih iteracijah še ni dosežen konvergenčni kriterij, rešitev prav tako še ni dosežena.

## 3. Naloga[1]:

Izračunajte molsko prostornino butana pri $T$ = 368,25 K in tlaku $p$ = 763,5 mmHg po virialni enačbi stanja oblike:

$$p = \frac{R \cdot T}{V_\mathrm{m}}\left(1 + \frac{B}{V_\mathrm{m}}\right)$$

Virialni koeficient $B = -\,444{,}2\ \frac{\mathrm{cm}^3}{\mathrm{mol}}$, splošna plinska konstanta $R = 62\,361\ \frac{\mathrm{cm}^3 \cdot \mathrm{mmHg}}{\mathrm{mol} \cdot \mathrm{K}}$.

Pri reševanju uporabite:

a) grafično metodo,
b) metodo zaporedne substitucije. Funkcijo preoblikujte tako, da bo iteracijsko zaporedje konvergiralo k rešitvi. Kateri pogoj mora biti izpolnjen? Izvedite 3 iteracije in preverite, ali ste dosegli rešitev, če je $\varepsilon = 1\times10^{-4}$ Začetni $V_\mathrm{m}^{(1)} = 10\,000\ \frac{\mathrm{cm}^3}{\mathrm{mol}}$!

---

**Rešitev:**

a) Pri reševanju funkcije z **grafično metodo** zapišemo funkcijo v obliki $f(x) = 0$. Torej za naš primer velja:

$$f(V_\mathrm{m}) = 0$$

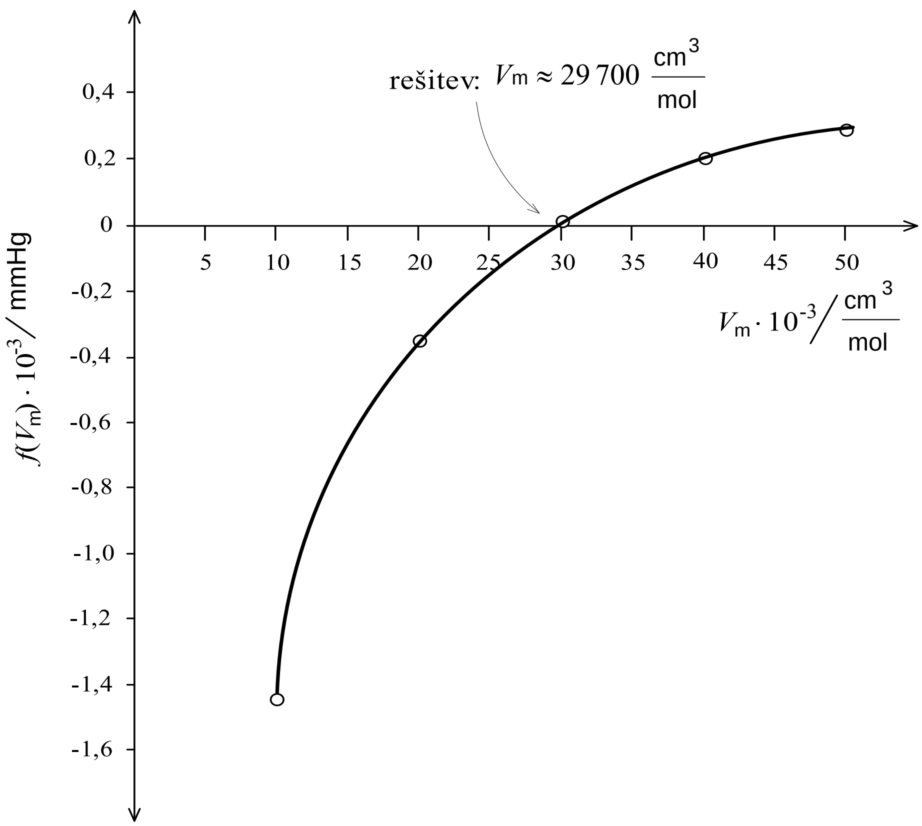
in dalje:

$$f(V_\mathrm{m}) = p - \frac{R \cdot T}{V_\mathrm{m}}\left(1 + \frac{B}{V_\mathrm{m}}\right) = 0$$

Predpostavimo nekaj vrednosti za $V_\mathrm{m}$ in pri vsaki vrednosti izračunajmo $f(V_\mathrm{m})$:

| $V_m$ / (cm$^3$/mol) | $f(V_m) = p - \frac{R \cdot T}{V_m}\left(1 + \frac{B}{V_m}\right)$ / mmHg |
|---|---|
| 10 000 | – 1431 |
| 20 000 | – 359 |
| 30 000 | 9,4 |
| 40 000 | 196 |
| 50 000 | 308 |

Narišemo graf. Na ordinato nanašamo vrednosti $f(V_m)$ in na absciso $V_m$. Kjer funkcija $f(V_m)$ seka absciso, dobimo rešitev.




Že iz podatkov v preglednici lahko sklepamo, da bo rešitev blizu 30 000 $\frac{cm^3}{mol}$ saj $f(V_m)$ menja predznak v bližini te vrednosti. Odčitana vrednost $V_m \approx 29\,700\ \frac{cm^3}{mol}$.

b) Reševanje problema z metodo **zaporedne substitucije**.

Funkcijo zapišemo v obliko $V_\mathrm{m} = f(V_\mathrm{m})$. Ena od možnosti je naslednja:

$$p = \frac{R \cdot T}{V_\mathrm{m}}\left(1 + \frac{B}{V_\mathrm{m}}\right) \quad / \cdot V_\mathrm{m}$$

$$p \cdot V_\mathrm{m} = R \cdot T\left(1 + \frac{B}{V_\mathrm{m}}\right) \quad / : p$$

$$V_\mathrm{m} = \frac{R \cdot T\left(1 + \frac{B}{V_\mathrm{m}}\right)}{p}$$

Preverimo, če bomo z izpeljano obliko funkcije, pri $V_\mathrm{m}^{(1)} = 10\,000\ \frac{\mathrm{cm}^3}{\mathrm{mol}}$, dosegli rešitev. Če bo izpolnjen pogoj $|f\,'(V_\mathrm{m})| < 1$, potem bo zaporedje konvergiralo k rešitvi. V nasprotnem primeru rešitve ne bomo dosegli (zaporedje bo divergiralo).

Ker v nalogi ni posebej poudarjen način odvajanja funkcije, ter določitev vrednosti odvoda pri $V_\mathrm{m}^{(1)}$, bomo odvod funkcije $f(V_\mathrm{m})$ najprej poiskali **analitično** z odvajanjen po $V_\mathrm{m}$.

- zapišimo gornjo obliko funkcije $f(V_\mathrm{m})$ v obliko primerno za analitično odvajanje:

$$f(V_\mathrm{m}) = \frac{R \cdot T}{p} + \frac{R \cdot T \cdot B}{p} \cdot \frac{1}{V_\mathrm{m}}$$

$$f(V_\mathrm{m}) = \frac{R \cdot T}{p} + \frac{R \cdot T \cdot B}{p} \cdot V_\mathrm{m}^{-1}$$

$$f'(V_\mathrm{m}) = -\frac{R \cdot T \cdot B}{p} \cdot V_\mathrm{m}^{-2}$$

Veljati mora:

$$\left|f'(V_\mathrm{m}^{(1)})\right| < 1$$

$$\left|-\frac{R \cdot T \cdot B}{p} \cdot (V_\mathrm{m}^{(1)})^{-2}\right| < 1$$

Vstavimo v gornji izraz znane podatke:

$$\left|-\frac{62\,361 \cdot 368{,}25 \cdot (-444{,}2)}{763{,}5} \cdot 10\,000^{-2}\right| = 0{,}1336 < 1$$

Pogoj je izpolnjen, torej bomo z izpeljano obliko za $f(V_\mathrm{m})$ našli rešitev.

- sedaj poiščimo odvod funkcije **numerično** z aproksimacijo odvoda z enačbo:

$$f'(V_\mathrm{m}^{(k)}) = \frac{f(V_\mathrm{m}^{(k)}+\delta) - f(V_\mathrm{m}^{(k)})}{\delta}$$

Pri $k = 1$ imamo začetno vrednost $V_\mathrm{m}^{(1)} = 10\,000\ \frac{\mathrm{cm^3}}{\mathrm{mol}}$, pri kateri izračunamo vrednost odvoda. Predpostavimo, da je $\delta = 1$.

$$f'(V_\mathrm{m}^{(1)}) = \frac{f(10\,001) - f(10\,000)}{1} = \frac{28\,741{,}925 - 28\,741{,}792}{1} = 0{,}133$$

oz.

$$\left|f'(V_\mathrm{m}^{(1)})\right| < 1$$

Sedaj, ko smo na oba načina dokazali, da je pogoj izpolnjen, lahko pričnemo z iteracijskim postopkom. Izvedimo prve tri iteracije. Splošno velja:

$$x^{(k+1)} = f(x^{(k)}) \qquad \text{in} \qquad \left|\frac{x^{(k+1)} - x^{(k)}}{x^{(k)}}\right| \le \varepsilon$$

in za naš primer:

$$V_\mathrm{m}^{(k+1)} = f(V_\mathrm{m}^{(k)}) \qquad \text{in} \qquad \left|\frac{V_\mathrm{m}^{(k+1)} - V_\mathrm{m}^{(k)}}{V_\mathrm{m}^{(k)}}\right| \le \varepsilon$$

**1. <u>iteracija:</u>**

$k = 1 \qquad V_\mathrm{m}^{(1)} = 10\,000\ \frac{\mathrm{cm^3}}{\mathrm{mol}}$

$$V_\mathrm{m}^{(2)} = f(V_\mathrm{m}^{(1)}) = \frac{62\,361\ \mathrm{cm^3\ mmHg} \cdot 368{,}25\ \mathrm{K} \cdot \left(1 + \frac{-444{,}2\ \mathrm{cm^3\ mol}}{10\,000\ \mathrm{cm^3\ mol}}\right)}{\mathrm{mol\ K}\ 763{,}5\ \mathrm{mmHg}} = 28\,741{,}8\ \frac{\mathrm{cm^3}}{\mathrm{mol}}$$

$$\left|\frac{28\,741{,}8 - 10\,000}{10\,000}\right| = 1{,}8742 > 1 \times 10^{-4}$$

**2. <u>iteracija:</u>**

$k = 2$

$$V_{\mathrm{m}}^{(3)} = f(V_{\mathrm{m}}^{(2)}) = \frac{62361 \cdot 368{,}25 \cdot \left(1 + \frac{-444{,}2}{28741{,}8}\right)}{763{,}5} = 29613\ \frac{\mathrm{cm}^3}{\mathrm{mol}}$$

$$\left|\frac{29613 - 28741{,}8}{28741{,}8}\right| = 0{,}0303 > \varepsilon$$

**3. <u>iteracija:</u>**

$k = 3$

$$V_{\mathrm{m}}^{(4)} = f(V_{\mathrm{m}}^{(3)}) = \frac{62361 \cdot 368{,}25 \cdot \left(1 + \frac{-444{,}2}{29613}\right)}{763{,}5} = 29626{,}7\ \frac{\mathrm{cm}^3}{\mathrm{mol}}$$

$$\left|\frac{29626{,}7 - 29613}{29613}\right| = 0{,}00046 > \varepsilon$$

Preglednica z rezultati:

| $k$ | $V_{\mathrm{m}}^{(k)}$ | $f(V_{\mathrm{m}}^{(k)}) = V_{\mathrm{m}}^{(k+1)}$ | $\left\lvert\frac{V_{\mathrm{m}}^{(k+1)} - V_{\mathrm{m}}^{(k)}}{V_{\mathrm{m}}^{(k)}}\right\rvert$ |
|---|---|---|---|
| 1 | 10 000 | 28 741,8 | 1,8742 |
| 2 | 28 741,8 | 29 613 | 0,0303 |
| 3 | 29 613 | 29 626,7 | 0,00046 |

<u>Rezultat</u>:
Po treh iteracijah še ni izpolnjen konvergenčni kriterij in torej ni dosežena rešitev.

**4. Naloga:**

Rešite prejšnjo nalogo z Wegsteinovo metodo. Zapišite funkcijo v obliko primerno za reševanje z omenjeno metodo. Začetna vrednost $V_{\mathrm{m}}^{(1)} = 10\,000\ \frac{\mathrm{cm}^3}{\mathrm{mol}}$. Izvedite tri iteracije in komentirajte rezultat. Ali je dosežena rešitev, če je $\varepsilon = 1\times10^{-4}$ ?

---

**Rešitev:**

Funkcijo izrazimo v obliki $V_m = f(V_m)$. Uporabimo enako obliko kot pri metodi zaporedne substitucije. Torej:

$$V_m = \frac{R \cdot T \left(1 + \frac{B}{V_m}\right)}{p}$$

**1. iteracija:**

Izvedemo jo na enak način kot pri metodi zaporedne substitucije.
Torej:

$k = 1$ $\qquad V_m^{(1)} = 10\ 000\ \frac{\text{cm}^3}{\text{mol}}$

$V_m^{(2)} = f(V_m^{(1)}) = 28\ 741{,}8\ \frac{\text{cm}^3}{\text{mol}}$ $\qquad \left|\frac{28\,741{,}8 - 10\,000}{10\,000}\right| = 1{,}8742 > \varepsilon$

**2. iteracija:**

$k = 2$

$$V_m^{(3)} = t \cdot f(V_m^{(2)}) + (1-t) \cdot V_m^{(2)}$$

$$t = \frac{1}{1-s}$$

$$s = \frac{f(V_m^{(2)}) - f(V_m^{(1)})}{V_m^{(2)} - V_m^{(1)}}$$

$f(V_m^{(1)}) = 28\,741{,}8 \qquad V_m^{(1)} = 10\,000$

$f(V_m^{(2)}) = 29\,613 \qquad V_m^{(2)} = 28\,741{,}8$

$$s = \frac{29\,613 - 28\,741{,}8}{28\,741{,}8 - 10\,000} = \frac{-871{,}2}{-18\,741{,}8} = 0{,}04648$$

$$t = \frac{1}{1 - 0{,}04648} = 1{,}0487$$

$$V_m^{(3)} = 1{,}0487 \cdot 29\,613 + (1 - 1{,}0487) \cdot 28\,741{,}8 = 31055{,}1 - 1399{,}7 = 29\,655{,}4\ \frac{\text{cm}^3}{\text{mol}}$$

$$\left|\frac{29\,655{,}4 - 28\,741{,}8}{28\,741{,}8}\right| = 0{,}0318 > \varepsilon$$

**3. iteracija:**

$$V_{\text{m}}^{(4)} = t \cdot f(V_{\text{m}}^{(3)}) + (1-t) \cdot V_{\text{m}}^{(3)}$$

$k = 3$
$$t = \frac{1}{1-s}$$

$$s = \frac{f(V_{\text{m}}^{(3)}) - f(V_{\text{m}}^{(2)})}{V_{\text{m}}^{(3)} - V_{\text{m}}^{(2)}}$$

$f(V_{\text{m}}^{(2)}) = 29\,613 \qquad V_{\text{m}}^{(2)} = 28\,741{,}8$

$f(V_{\text{m}}^{(3)}) = 29\,627{,}3 \qquad V_{\text{m}}^{(3)} = 29\,655{,}4$

$$s = \frac{29\,627{,}3 - 29\,613}{29\,655{,}4 - 28\,741{,}8} = 0{,}0156$$

$$t = \frac{1}{1 - 0{,}0156} = 1{,}0158$$

$$V_{\text{m}}^{(4)} = 1{,}0158 \cdot 29\,627{,}3 + (-0{,}0158) \cdot 29\,655{,}4 = 30\,095{,}4 - 468{,}6 = 29\,626{,}8\ \frac{\text{cm}^3}{\text{mol}}$$

$$\left|\frac{29\,626{,}8 - 29\,655{,}4}{29\,655{,}4}\right| = 9{,}6 \times 10^{-4} > \varepsilon$$

Preglednica z rezultati:

| $k$ | $V_{\text{m}}^{(k)}$ | $s$ | $t$ | $V_{\text{m}}^{(k+1)}$ | $\left\lvert\frac{V_{\text{m}}^{(k+1)} - V_{\text{m}}^{(k)}}{V_{\text{m}}^{(k)}}\right\rvert$ |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 10 000 | – | – | 28 741,8 | 1,8742 |
| 2 | 28 741,8 | 0,04648 | 1,0487 | 29 655,4 | 0,0318 |
| 3 | 29 655,4 | 0,0156 | 1,0158 | 29 626,8 | 0,00096 |

Rezultat:
Po treh iteracijah še ni izpolnjen konvergenčni kriterij in torej rešitev še ni dosežena.

**5. Naloga:**

Rešite primer iz naloge 3 z Newtonovo metodo. Zapišite funkcijo v obliko primerno za reševanje z omenjeno metodo. Začetna vrednost $V_{\text{m}}^{(1)} = 10\,000\ \frac{\text{cm}^3}{\text{mol}}$. Izvedite tri iteracije in komentirajte rezultat. Ali je dosežena rešitev, če je $\varepsilon = 1 \times 10^{-4}$ ?
Rezultat primerjajte z rezultatom dobljenim po idealni plinski enačbi!

---

**Rešitev:**

Funkcijo pripravimo v obliko $f(x) = 0$ oz. za naš primer $f(V_\mathrm{m}) = 0$. Torej velja:

$$f(V_\mathrm{m}) = p - \frac{R \cdot T}{V_\mathrm{m}}\left(1 + \frac{B}{V_\mathrm{m}}\right) = 0$$

$$f(V_\mathrm{m}) = p - \frac{R \cdot T}{V_\mathrm{m}} - \frac{R \cdot T \cdot B}{V_\mathrm{m}^2} = 0$$

kakor tudi :

$$f(V_\mathrm{m}) = p - R \cdot T \cdot V_\mathrm{m}^{-1} - R \cdot T \cdot B \cdot V_\mathrm{m}^{-2} = 0$$

Splošni izraz za reševanje problema z Newtonovo metodo je:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})} \qquad (k = 1, 2, \ldots\ldots\ldots)$$

in za naš primer:

$$V_\mathrm{m}^{(k+1)} = V_\mathrm{m}^{(k)} - \frac{f(V_\mathrm{m}^{(k)})}{f'(V_\mathrm{m}^{(k)})}$$

Ker potrebujemo še odvod funkcije, ga izrazimo analitično:

$$f'(V_\mathrm{m}) = R \cdot T \cdot V_\mathrm{m}^{-2} + 2 \cdot R \cdot T \cdot B \cdot V_\mathrm{m}^{-3} = \frac{R \cdot T}{V_\mathrm{m}^2} + \frac{2 \cdot R \cdot T \cdot B}{V_\mathrm{m}^3}$$

**1. iteracija:**

$k = 1 \qquad V_\mathrm{m}^{(1)} = 10\,000\ \frac{\mathrm{cm}^3}{\mathrm{mol}}$

$$V_\mathrm{m}^{(2)} = V_\mathrm{m}^{(1)} - \frac{f(V_\mathrm{m}^{(1)})}{f'(V_\mathrm{m}^{(1)})} = V_\mathrm{m}^{(1)} - \frac{p - R \cdot T \cdot (V_\mathrm{m}^{(1)})^{-1} - R \cdot T \cdot B \cdot (V_\mathrm{m}^{(1)})^{-2}}{R \cdot T \cdot (V_\mathrm{m}^{(1)})^{-2} + 2 \cdot R \cdot T \cdot B \cdot (V_\mathrm{m}^{(1)})^{-3}} =$$

$$V_\mathrm{m}^{(2)} = 10000 - \frac{763{,}5 - 62361 \cdot 368{,}25 \cdot 10000^{-1} - 62361 \cdot 368{,}25 \cdot (-444{,}2) \cdot 10000^{-2}}{62361 \cdot 368{,}25 \cdot 10000^{-2} + 2 \cdot 62361 \cdot 368{,}25 \cdot (-444{,}2) \cdot 10000^{-3}} =$$

$$V_\mathrm{m}^{(2)} = 10000 - \frac{763{,}5 - 2296{,}44 + 102{,}008}{0{,}2296 - 0{,}0204} = 10000 - \frac{-1430{,}932}{0{,}2092} = 16840\ \frac{\mathrm{cm}^3}{\mathrm{mol}}$$

$$\left|\frac{16840-10\,000}{10\,000}\right| = 0{,}684 > \varepsilon$$

**2. iteracija:**

$k = 2$ $\qquad V_{\mathrm{m}}^{(2)} = 16\ 840\ \dfrac{\mathrm{cm}^3}{\mathrm{mol}}$

$$V_{\mathrm{m}}^{(3)} = V_{\mathrm{m}}^{(2)} - \frac{f(V_{\mathrm{m}}^{(2)})}{f'(V_{\mathrm{m}}^{(2)})} =$$

$$= 16840 - \frac{763{,}5 - 62361\cdot 368{,}25\cdot 16840^{-1} - 62361\cdot 368{,}25\cdot(-444{,}2)\cdot 16840^{-2}}{62361\cdot 368{,}25\cdot 16840^{-2} + 2\cdot 62361\cdot 368{,}25\cdot(-444{,}2)\cdot 16840^{-3}} =$$

$$V_{\mathrm{m}}^{(3)} = 16840 - \frac{763{,}5 - 1363{,}684 + 35{,}97}{0{,}08098 - 0{,}00427} = 16840 - \frac{-564{,}214}{0{,}07671} = 24195{,}1$$

$$\left|\frac{24195{,}1-16840}{16840}\right| = 0{,}437 > \varepsilon$$

**3. iteracija:**

$k = 3$ $\qquad V_{\mathrm{m}}^{(3)} = 24\ 195{,}1\ \dfrac{\mathrm{cm}^3}{\mathrm{mol}}$

$$V_{\mathrm{m}}^{(4)} = V_{\mathrm{m}}^{(3)} - \frac{f(V_{\mathrm{m}}^{(3)})}{f'(V_{\mathrm{m}}^{(3)})} =$$

$$= 24195{,}1 - \frac{763{,}5 - 62361\cdot 368{,}25\cdot 24195{,}1^{-1} - 62361\cdot 368{,}25\cdot(-444{,}2)\cdot 24195{,}1^{-2}}{62361\cdot 368{,}25\cdot 24195{,}1^{-2} + 2\cdot 62361\cdot 368{,}25\cdot(-444{,}2)\cdot 24195{,}1^{-3}} =$$

$$V_{\mathrm{m}}^{(4)} = 24195{,}1 - \frac{763{,}5 - 949{,}136 + 17{,}425}{0{,}0392 - 0{,}00144} = 24195{,}1 - \frac{-168{,}211}{0{,}03776} = 28649{,}8$$

$$\left|\frac{28649{,}8-24195{,}1}{24195{,}1}\right| = 0{,}184 > \varepsilon$$

Preglednica z rezultati:

| $k$ | $V_{\mathrm{m}}^{(k)}$ | $V_{\mathrm{m}}^{(k+1)}$ | $\left\lvert \dfrac{V_{\mathrm{m}}^{(k+1)} - V_{\mathrm{m}}^{(k)}}{V_{\mathrm{m}}^{(k)}} \right\rvert$ |
|---|---|---|---|
| 1 | 10 000 | 16 840 | 0,684 |
| 2 | 16 840 | 24 195,1 | 0,437 |
| 3 | 24 195,1 | 28 649,8 | 0,184 |

<u>Rezultat:</u>
Po treh iteracijah še ni dosežena rešitev.

Izračun molske prostornine iz **splošne plinske enačbe**:

Za 1 mol idealnega plina velja: $p \cdot V_{\mathrm{m}} = R \cdot T$

Izrazimo molsko prostornino:

$$V_{\mathrm{m}} = \frac{R \cdot T}{p} = \frac{62361 \ \mathrm{cm}^3 \ \mathrm{mmHg} \ 368{,}25 \ \mathrm{K}}{\mathrm{mol} \ \mathrm{K} \ 763{,}5 \ \mathrm{mmHg}} = 30078 \ \frac{\mathrm{cm}^3}{\mathrm{mol}}$$

Molska prostornina, dobljena iz splošne plinske enačbe se nekoliko razlikuje zaradi idealnosti plina.

**6. Naloga:**

Rešite problem iz naloge 3 z metodo polovičnega intervala. Začetni interval naj bo:

$$V_{\mathrm{m},\ell}^{(1)} = 10000 \ \frac{\mathrm{cm}^3}{\mathrm{mol}}$$

$$V_{\mathrm{m,d}}^{(1)} = 30000 \ \frac{\mathrm{cm}^3}{\mathrm{mol}}$$

Rezultat naj bo v območju 0,1 $\frac{\mathrm{cm}^3}{\mathrm{mol}}$! Izračunajte potrebno število iteracij, po katerih dosežete želen rezultat, ter prikažite izračun prvih treh iteracij.

---

**<u>Rešitev:</u>**

Potrebno število iteracij:

Začetni interval: $I_1 = 20\,000$
Končni interval: $I_2 = 0{,}1$

$$\frac{I_1}{I_2} = \frac{20\,000}{0{,}1} = 200\ 000$$

$$\frac{1}{\beta} = 200\ 000$$

$$\beta = 5 \times 10^{-6}$$

$N$ = - 1,44 ln $\beta$ = - 1,44 ln (5 $\times 10^{-6}$) = 18

Za dosego končnega rezultata bo potrebnih 18 iteracij.

Pri reševanju z metodo polovičnega intervala, pripravimo funkcijo v obliko $f(x) = 0$ oziroma za naš primer $f(V_{\mathrm{m}}) = 0$. Torej velja:

$$f(V_{\mathrm{m}}) = p - \frac{R \cdot T}{V_{\mathrm{m}}}\left(1 + \frac{B}{V_{\mathrm{m}}}\right) = 0$$

**1. <u>iteracija:</u>**

$$V_{\mathrm{m},\ell}^{(1)} = 10\,000\ \frac{\mathrm{cm}^3}{\mathrm{mol}}$$

$$V_{\mathrm{m,d}}^{(1)} = 30\,000\ \frac{\mathrm{cm}^3}{\mathrm{mol}}$$

$$f(V_{\mathrm{m},\ell}^{(1)}) = f(10\,000) = 763{,}5 - \frac{62\,361 \cdot 368{,}25}{10\,000} \cdot \left(1 + \frac{(-444{,}2)}{10\,000}\right) = 763{,}5 - 2194 = -1430{,}5$$

$$f(V_{\mathrm{m,d}}^{(1)}) = f(30\,000) = 763{,}5 - \frac{62\,361 \cdot 368{,}25}{30\,000} \cdot \left(1 + \frac{(-444{,}2)}{30\,000}\right) = 9{,}4$$

Vrednosti funkcij imata nasprotni predznak (obstaja rešitev).
Ocenjena vrednost:

$$V_{\mathrm{m,s}} = \frac{30\,000 + 10\,000}{2} = 20\,000$$

$$f(V_{\mathrm{m,s}}) = -359$$

Ker ima $f(V_{\mathrm{m,s}})$ isti predznak kot $f(V_{\mathrm{m},\ell}^{(1)})$, velja:

$$V_{\mathrm{m},\ell}^{(2)} = V_{\mathrm{m,s}} = 20\,000$$

$$V_{\mathrm{m,d}}^{(2)} = V_{\mathrm{m,d}}^{(1)} = 30\,000$$

Tako smo postavili novi meji za naslednjo iteracijo.

**2. iteracija:**

$$f(V_{\mathrm{m},\ell}^{(2)}) = f(20\,000) = -359$$
$$f(V_{\mathrm{m,d}}^{(2)}) = f(30\,000) = 9{,}4$$

$$V_{\mathrm{m,s}} = \frac{20\,000 + 30\,000}{2} = 25\,000$$

$$f(V_{\mathrm{m,s}}) = f(25\,000) = 763{,}5 - \frac{62\,361 \cdot 368{,}25}{25\,000} \cdot \left(1 + \frac{(-444{,}2)}{25\,000}\right) = 763{,}5 - 902 = -138{,}5$$

Ker ima $f(V_{\mathrm{m,s}})$ isti predznak kot $f(V_{\mathrm{m},\ell}^{(2)})$ velja:

$$V_{\mathrm{m},\ell}^{(3)} = V_{\mathrm{m,s}} = 25\,000$$
$$V_{\mathrm{m,d}}^{(3)} = V_{\mathrm{m,d}}^{(2)} = 30\,000$$

Tako smo postavili novi meji za naslednjo iteracijo.

**3. iteracija:**

$$f(V_{\mathrm{m},\ell}^{(3)}) = 763{,}5 - \frac{62\,361 \cdot 368{,}25}{25\,000} \cdot \left(1 + \frac{(-444{,}2)}{25\,000}\right) = -138{,}5$$
$$f(V_{\mathrm{m,d}}^{(3)}) = 9{,}4$$

$$V_{\mathrm{m,s}} = \frac{25\,000 + 30\,000}{2} = 27\,500$$

$$f(V_{\mathrm{m,s}}) = 763{,}5 - \frac{62\,361 \cdot 368{,}25}{27\,500} \cdot \left(1 + \frac{(-444{,}2)}{27\,500}\right) = 763{,}5 - 821{,}5 = -58$$

Funkcija $f(V_{\mathrm{m,s}})$ ima isti predznak kot $f(V_{\mathrm{m},\ell}^{(3)})$. Torej veljajo za naslednji interval meje:

$$V_{\mathrm{m},\ell}^{(4)} = V_{\mathrm{m,s}} = 27\,500$$

$$V_{\mathrm{m,d}}^{(4)} = V_{\mathrm{m,d}}^{(3)} = 30\,000$$

$$V_{\mathrm{m,s}} = \frac{27\,500 + 30\,000}{2} = 28\,750$$

itd.

Preglednica z rezultati:

| $k$ | $V_{m,\ell}^{(k)}$ | $V_{m,d}^{(k)}$ |
|---|---|---|
| 1 | 10 000 | 30 000 |
| 2 | 20 000 | 30 000 |
| 3 | 25 000 | 30 000 |
| . | . | . |
| . | . | . |
| . | . | . |

**7. Naloga:**

Funkcija $x^3 - 4x^2 + 5x - 2 = 0$ ima rešitvi pri $x = 1$ in $x = 2$.

a) Ali dosežemo rešitev z metodo zaporedne substitucije že po treh iteracijah, če je $x^{(1)} = 1{,}8$ ? H kateri vrednosti rešitve konvergira zaporedje?

b) H kateri vrednosti rešitve konvergira zaporedje, če predpostavimo začetno vrednost $x^{(1)} = 0{,}9$ in za izračun uporabimo Newtonovo metodo? Izvedite tri iteracije!

-----------------------------------------------------------------------------------------------------------

**Rešitev:**

a) Reševanje z metodo **zaporedne substitucije**:

Funkcijo izrazimo kot $x = f(x)$.
Torej:

$$x^3 - 4x^2 + 5x - 2 = 0$$

$$5x = -x^3 + 4x^2 + 2 \quad / : 5$$

$$x = \frac{-x^3}{5} + \frac{4x^2}{5} + \frac{2}{5} = -0{,}2x^3 + 0{,}8x^2 + 0{,}4$$

$$x = -0{,}2x^3 + 0{,}8x^2 + 0{,}4 = f(x)$$

**1. iteracija:**

$k = 1$ $\qquad$ $x^{(1)} = 1{,}8$

$$x^{(2)} = f(x^{(1)}) = f(1{,}8) = -0{,}2 \cdot 1{,}8^3 + 0{,}8 \cdot 1{,}8^2 + 0{,}4 = -1{,}1664 + 2{,}592 + 0{,}4 = 1{,}826$$

$$\left|\frac{x^{(2)}-x^{(1)}}{x^{(1)}}\right| = \left|\frac{1{,}826-1{,}8}{1{,}8}\right| = 0{,}0144$$

**2. iteracija:**

$k = 2$

$$x^{(3)} = f(x^{(2)}) = f(1{,}826) = -0{,}2\cdot 1{,}826^3 + 0{,}8\cdot 1{,}826^2 + 0{,}4 = -1{,}218 + 2{,}667 + 0{,}4 \cong 1{,}85$$

$$\left|\frac{x^{(3)}-x^{(2)}}{x^{(2)}}\right| = \left|\frac{1{,}85-1{,}826}{1{,}826}\right| = 0{,}0131$$

**3. iteracija:**

$k = 3$

$$x^{(4)} = f(x^{(3)}) = f(1{,}85) = -0{,}2\cdot 1{,}85^3 + 0{,}8\cdot 1{,}85^2 + 0{,}4 = -1{,}266 + 2{,}738 + 0{,}4 = 1{,}872$$

$$\left|\frac{x^{(4)}-x^{(3)}}{x^{(3)}}\right| = \left|\frac{1{,}872-1{,}85}{1{,}85}\right| = 0{,}0119$$

Preglednica z rezultati:

| $k$ | $x^{(k)}$ | $x^{(k+1)} = f(x^{(k)})$ |
|---|---|---|
| 1 | 1,8 | 1,826 |
| 2 | 1,826 | 1,85 |
| 3 | 1,85 | 1,872 |

Rezultat:
Po treh iteracijah še ne dosežemo rešitve. Iteracijsko zaporedje se približuje vrednosti 2.

**b) Newtonova metoda.**

Funkcijo pripravimo v obliko $f(x) = 0$. Torej velja:

$$f(x) = x^3 - 4x^2 + 5x - 2 = 0$$

Analitično izražen odvod funkcije:

$$f'(x) = 3x^2 - 8x + 5$$

**1. iteracija:**

$k = 1 \qquad x^{(1)} = 0{,}9$

$$x^{(2)} = x^{(1)} - \frac{f(x^{(1)})}{f'(x^{(1)})} = 0{,}9 - \frac{(-0{,}011)}{0{,}23} = 0{,}948$$

$$f(0{,}9) = 0{,}9^3 - 4 \cdot 0{,}9^2 + 5 \cdot 0{,}9 - 2 = 0{,}729 - 3{,}24 + 4{,}5 - 2 = -0{,}011$$

$$f'(0{,}9) = 3 \cdot 0{,}9^2 - 8 \cdot 0{,}9 + 5 = 2{,}43 - 7{,}2 + 5 = 0{,}23$$

$$\left| \frac{0{,}948 - 0{,}9}{0{,}9} \right| = 0{,}0533$$

**2. iteracija:**

$k = 2$

$$x^{(3)} = x^{(2)} - \frac{f(x^{(2)})}{f'(x^{(2)})} = 0{,}948 - \frac{(-0{,}003)}{0{,}112} = 0{,}975$$

$$f(x^{(2)}) = 0{,}948^3 - 4 \cdot 0{,}948^2 + 5 \cdot 0{,}948 - 2 = 0{,}852 - 3{,}595 + 4{,}74 - 2 = -0{,}003$$

$$f'(x^{(2)}) = 3 \cdot 0{,}948^2 - 8 \cdot 0{,}948 + 5 = 2{,}696 - 7{,}584 + 5 = 0{,}112$$

$$\left| \frac{0{,}975 - 0{,}948}{0{,}948} \right| = 0{,}028$$

**3. iteracija:**

$k = 3$

$$x^{(4)} = x^{(3)} - \frac{f(x^{(3)})}{f'(x^{(3)})} = 0{,}975 - \frac{(-0{,}0007)}{0{,}052} = 0{,}988$$

$$f(0{,}975) = 0{,}975^3 - 4 \cdot 0{,}975^2 + 5 \cdot 0{,}975 - 2 = 0{,}9268 - 3{,}8025 + 4{,}875 - 2 = -0{,}0007$$

$$f'(0{,}975) = 3 \cdot 0{,}975^2 - 8 \cdot 0{,}975 + 5 = 2{,}852 - 7{,}8 + 5 = 0{,}052$$

$$\left| \frac{0{,}988 - 0{,}975}{0{,}975} \right| = 0{,}0133$$

Preglednica z rezultati:

| $k$ | $x^{(k)}$ | $x^{(k+1)}$ | $\left\lvert \frac{x^{(k+1)} - x^{(k)}}{x^{(k)}} \right\rvert$ |
|---|---|---|---|
| 1 | 0,9 | 0,948 | 0,0533 |
| 2 | 0,948 | 0,975 | 0,028 |
| 3 | 0,975 | 0,988 | 0,0133 |

Rezultat:
Iteracijsko zaporedje se približuje rešitvi 1. Po treh iteracijah še ni dosežena rešitev.

## LITERATURA:

1. Myers A. L., Seider W. D., Introduction to Chemical Engineering and Computer Calculations, Prentice-Hall, Inc., New Jersey, 1976.